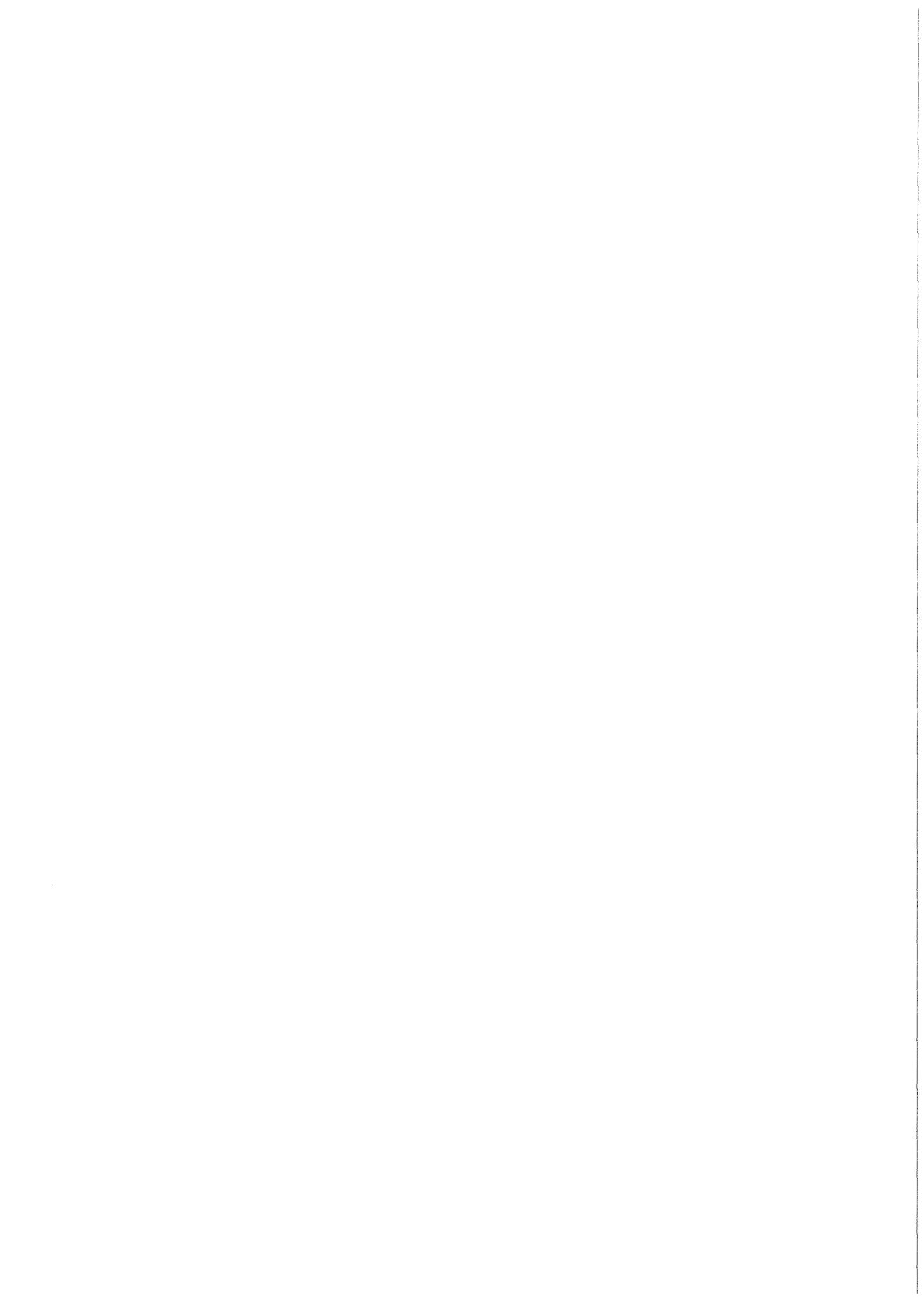


KfK 3603
Dezember 1983

**Der Brennstabcode
TRANSIENT
zur Beschreibung des
Brennstabverhaltens
unter instationären
Betriebsbedingungen**

H. Steiner
Institut für Material- und Festkörperforschung
Projekt Schneller Brüter

Kernforschungszentrum Karlsruhe



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Material- und Festkörperforschung
Projekt Schneller Brüter

KfK 3603

Der Brennstabcode TRANSIENT zur Beschreibung des Brennstabverhaltens
unter instationären Betriebsbedingungen

H. Steiner

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH., Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

Z u s a m m e n f a s s u n g

Der Brennstabcode TRANSIENT zur Beschreibung des Brennstabverhaltens unter instationären Betriebsbedingungen

Im Rahmen der Arbeiten zur Sicherheit natriumgekühlter schneller Brutreaktoren nimmt das Brennstabverhalten unter instationären Betriebsbedingungen einen wichtigen Platz ein.

Wegen der Vielzahl der experimentellen Parameter und der Kompliziertheit der physikalischen Prozesse kann man sich nicht allein auf experimentelle Aussagen beschränken, sondern muß versuchen, das Brennstabverhalten im Rahmen von Rechencodes theoretisch zu beschreiben.

Diese Arbeit enthält eine Beschreibung des Rechencodes TRANSIENT, der entwickelt wurde, um Experimente zum instationären Brennstabverhalten auszulegen und zu analysieren. Sein Anwendungsbereich erstreckt sich von milden Überlaststörfällen bis zu hypothetischen Leistungspulsen im einphasigen Kühlmittel. Das Brennstabverhalten ist bis zum Eintritt des Stabschadens modelliert; es fehlt also bis jetzt der wichtige Komplex der Brennstoffbewegung nach dem Stabschaden sowie die Modellierung des Kühlmittelsiedens.

Der Brennstabcode TRANSIENT setzt sich aus drei Blöcken zusammen. Im ersten Block werden die wichtigsten Phänomene der stationären Vorbestrahlung modelliert, der zweite Block liefert den T_0 -Ausgangszustand und der dritte Block behandelt dann die eigentliche Transiente.

Beschrieben wird das thermische Verhalten von Brennstoff, Hülle, Kühlmittel und Strukturmaterial bis zur thermischen Isolierung. Die Wärmeleitungsgleichung wird dabei nach einem Dreipunkt-Differenzenverfahren gelöst. Die Brennstabmechanik wird nach einem Drei-Zonenmodell behandelt. Das transiente Spaltgasverhalten wird im Rahmen eines Zwei-Blasengruppenmodells beschrieben, die stationäre Spaltgasfreisetzung und Spaltgasrückhaltung durch ein empirisches Modell.

Neben der Darstellung der theoretischen Grundlagen und der Codestruktur enthält dieser Bericht Ergebnisse von Anwendungsrechnungen. Diese zeigen, daß der Code im Rahmen seiner Anwendungsgrenzen eine tiefgehende Analyse von Brennstabexperimenten ermöglicht, daß aber noch zusätzliche Anstrengungen zur Weiterentwicklung geboten sind.

A b s t r a c t

The computer code TRANSIENT for the evaluation of fuel pin behaviour under non-steady reactor conditions

In the frame of R.&D. work on the safety of fast breeder reactors, fuel pin behaviour under non-steady conditions deserves a lot of effort.

Due to the quantity of experimental parameters and due to the complexity of the physical phenomena one cannot solely have recourse to experimental results but has to make an effort of modelling transient fuel pin behaviour.

This work includes a description of the fuel pin code TRANSIENT, which was developed for the design and evaluation of fuel pin experiments under accident conditions. Its field of application comprises mild overpower ramps as well as hypothetical power pulses in single-phase coolant. Fuel pin behaviour is modelled up to the occurrence of pin failure. Thus, up to now, the important phenomenon of fuel movement after failure is not modelled, as well as coolant boiling.

The computer code TRANSIENT consists of three different blocks. In the first block the most important pin phenomena of a steady-state pre-irradiation are modelled, the second block yields the description of the T_0 -state and the third block handles the virtual transient event.

In the code the thermal behaviour of fuel, clad, coolant and structural material up to the first thermal barrier is modelled. The heat conduction equation is solved in a finite three point difference scheme. Fuel pin mechanics are handled in the frame of a three-zone model and transient fission gas behaviour in the frame of a two-bubble-group model. Steady-state fission gas release and retention is calculated via an empirical relation.

Besides the representation of the theoretical basis of the modelling and of the code structure this report contains results of code calculations for some experiments. These calculations demonstrate the usefulness of the code for evaluation and interpretation of experiments within its field of application but they also showed the necessity of a further effort for development.

I n h a l t

Seite

Nomenklatur

1. Einleitung	1
2. Theoretische Grundlagen	2
2.1 Diskretisierung von Brennstabgeometrie und Betriebszeit	2
2.2 Temperaturberechnung	3
2.3 Mechanik Brennstoff/Hülle	14
2.4 Spaltgasverhalten	23
2.5 Druckaufbau in der Brennstoffschmelze	32
2.6 Brennstofftransport im Zentralkanal	35
2.7 Brennstoffaustrag in den Kühlkanal nach Eintritt des Stabschadens	36
3. Programmbeschreibung	37
3.1 Aufbau des Rechenprogramms	37
3.2 Organisation der Ein- und Ausgabe	40
4. Ergebnisse von Anwendungsrechnungen	49
4.1 Ergebnisse der thermischen Analyse	50
4.2 Ergebnisse der mechanischen Analyse	53
4.3 Ergebnisse zum Spaltgasverhalten	55

Literatur	58
-----------	----

Abb. 1 bis 21

Anhang

I - XV

N o m e n k l a t u r

D_g	=	Gitterdiffusionskonstante für das Spaltgas
D_s	=	Oberflächendiffusionskonstante
Δ	=	Schichtdicke für Oberflächendiffusion
Ω	=	Atomvolumen
v_O	=	Oberflächendichte der Metallatome
k	=	Boltzmann-Konstante
∇T	=	Temperaturgradient (makroskopisch)
Q_s	=	Oberflächendiffusion-Transportwärme
w	=	Van der Waals-Konstante
γ	=	Oberflächenspannung
D_u	=	Uran-Selbstdiffusionskonstante im Korn
a	=	Kornradius
L	=	Loschmidt-Zahl
A	=	Abbrand
ρ	=	Dichte
M	=	Molekulargewicht
V_{Mol}	=	Molvolumen
P	=	Porosität
μ	=	Viskosität
T	=	Temperatur
t	=	Zeit
r	=	Radius
c_p	=	Wärmekapazität
λ	=	Wärmeleitfähigkeit
q	=	Wärmequellldichte
h_{gap}	=	Wärmedurchgangszahl Brennstoff/Hülle
h_{sc}	=	Wärmedurchgangszahl Hülle/Natrium
α	=	thermischer Ausdehnungskoeffizient
δ^{ph}	=	Volumendehnung durch Brennstoffschmelzen
\dot{m}	=	Massendurchsatz
e	=	Emissivität
R_a	=	Rauhigkeit
δ	=	Spaltweite
l_{ex}	=	Extrapolationslängen
L_f	=	Brennstoffsäulenlänge
F	=	Fläche

$\bar{\alpha}$	=	Akkommodationskoeffizient
ϵ	=	Dehnung
u	=	Verschiebung
R, k	=	allgemeine Gaskonstante , Boltzmannkonstante
$\hat{\sigma}$	=	Stefan-Boltzmann-Konstante
E	=	E-Modul
σ	=	Spannung
p	=	Druck
ν	=	Poisson-Zahl
χ	=	Stableistung
C	=	Konzentration
S	=	Hüllwanddicke

I n d i c e s :

f	=	Brennstoff
H	=	Hülle
cool	=	Kühlmittel
S	=	Strukturmaterial
K	=	Kelvin bzw. Korn
KG	=	Korngrenze
g, gas	=	Gas
pl	=	plastisch
th	=	thermisch
fl	=	Fließ-
heal	=	Ausheilung
sw	=	Schwellen
pre	=	Prätransiente
por	=	Poren
trp	=	Transport
a	=	Außenindex
i	=	Innen- oder Laufindex
mw	=	Wandmitte
Kav	=	Schmelzkavität

1. Einleitung

Der Rechencode TRANSIENT war ursprünglich als Scheibenprogramm zur Beschreibung des Brennstabverhaltens unter relativ langsamen Störfalltransienten im Sekundenbereich konzipiert und entwickelt worden /1/. Er enthielt damals nur eine Beschreibung des thermo-mechanischen Verhaltens von Brennstoff und Hülle.

Die Wärmeleitungsgleichungen (stationär und instationär) wurden dabei nach einem von Bjørlo /2/ angegebenen Bilanzenverfahren gelöst. Schmelzvorgänge konnten nicht behandelt werden. Das mechanische Verhalten der Brennstabscheibe wurde nach einem im IMF I /3/ entwickelten Drei-Zonenmodell beschrieben.

Eine sehr umfassende Neugestaltung und Weiterentwicklung des Rechencodes, die zwischenzeitlich erfolgt ist, erlaubte es dann, TRANSIENT auch bei hypothetischen Störfällen vom CABRI-Typ einzusetzen.

Zur Lösung der Wärmeleitungsgleichungen in Brennstoff und Hülle wird nun ein implizites Drei-Punkt-Differenzenverfahren (Crank-Nicholson) verwendet. Der Code kann des weiteren Schmelzvorgänge beschreiben und er enthält Modelle zur Aufheizung von Kühlmittel und Strukturmaterial.

Ein weiterer Schwerpunkt betrifft die Implementierung des Spaltgasverhaltens. Es werden die Aspekte erfaßt, die für das Brennstabverhalten wichtig erscheinen: Spaltgasfreisetzung und -rückhaltung in der Vorbestrahlung und während der Transiente, Spaltgasblasen-Wanderung an die Korngrenzen und Spaltgastransport durch die Porenkanäle. Die modellmäßige Beschreibung des transienten Verhaltens basiert im wesentlichen auf den für den Spaltgas-Code KURZZEIT /4/ entwickelten Modellvorstellungen.

Im Zusammenhang mit Untersuchungen zum Stabversagen unter CABRI-TOP-Bedingungen wurde ein Unterprogramm entwickelt, das den Druckaufbau in der Brennstoffschmelze infolge Erschöpfung des zur Verfügung stehenden Leervolumens berechnet. Im Zusammenhang damit wird auch der Transport flüssigen Brennstoffs im Zentralkanal und der Brennstoffaustrag nach Eintritt des Stabschadens behandelt.

Eine Beschreibung der wichtigsten Ergebnisse der Vorbestrahlung (Spaltgasfreisetzung, Brennstoffumstrukturierung, Hüllschwellen) auf empirischer Basis macht TRANSIENT unabhängig von stationären Brennstabrechenodes.

Die Untersuchungen zum Druckaufbau in der Brennstoffschmelze machten den Ausbau von TRANSIENT zu einem umfassenden Brennstabcode erforderlich. Behandelt werden die axialen Bereiche über die ganze Brennstoffsäule und das Spaltgasplenum.

2. Theoretische Grundlagen

In TRANSIENT werden die drei wesentlichen Aspekte des Brennstabverhaltens behandelt, nämlich:

- 1.) Thermisches Verhalten von Brennstoff, Hülle, Kühlmittel und Strukturmaterial.
- 2.) Mechanisches Verhalten von Brennstoff und Hülle.
- 3.) Spaltgasverhalten

Die relevanten Differentialgleichungen werden nach finiten Differenzenverfahren bzw. mit Hilfe von Bilanzenverfahren gelöst.

2.1 Diskretisierung von Brennstabgeometrie und Betriebszeit

Die in TRANSIENT verwendeten Rechenmethoden zur Lösung der Wärmeleitungsgleichung, der Spannungsdehnungs-Verteilungen und des transienten Spaltgasverhaltens sind numerische Verfahren. Die Bereiche, in denen Lösungen der entsprechenden Differentialgleichungen gesucht werden, müssen diskretisiert, also durch sogenannte Stützstellen in kleine Intervalle eingeteilt werden.

Die finiten Differenzenverfahren liefern nun Lösungen an diesen Stützstellen. Zwischenwerte erhält man, falls benötigt, durch lineare Interpolation.

a) Diskretisierung der Betriebszeit

Es wird das maximale Rechenzeitintervall bei der Eingabe vorgegeben. Die Rechenverfahren sind nun so aufgebaut, daß eine Änderung des Rechenzeitintervalls im Laufe der Betriebszeit durchgeführt werden kann, wie z.B. bei hypothetischen Leistungsstörfällen. Hier ist eine automatische Zeitschrittsteuerung eingebaut, da die Änderungsgeschwindigkeit der Leistung während der Betriebszeit stark variiert.

Bei milden Überlaststörfällen und bei Kühlmitteldurchsatzstörungen wird mit konstantem Rechenzeitintervall operiert. Dieses wird gleich dem eingegebenen maximalen Rechenzeitintervall gesetzt. In verschiedenen Unterprogrammen (AXFLOI, FGTRA) wird bzw. kann das Zeitintervall gekürzt werden, falls der Rechengang es erfordert.

b) Diskretisierung von Brennstab und Kühlmittelaufheizstrecke

Wie schon in der Einleitung erwähnt, werden vom Brennstab nur die für das Verhalten wesentlichen axialen Partien erfaßt, nämlich die ganze Brennstoffsäule und das Spaltgasplenum. Die Brennstoffsäule wird in eine frei wählbare Zahl von äquidistanten axialen Segmenten unterteilt, die sukzessive durchgerechnet werden und zwar jeweils in der Mittenebene.

Tabletten- und Hüllrohrquerschnitt werden ihrerseits durch eine frei wählbare Zahl von Stützstellen unterteilt (siehe Abb. 1). Die Möglichkeit, diese Einteilung nicht-äquidistant zu machen, ist gegeben. Bis auf die äußerste und innerste werden die zu Beginn gewählten Stützstellen beibehalten. Eine Volumenvergrößerung wird durch eine Verschiebung der äußersten und innersten Stützstelle (Schließen von Zentralkanal und Spalt) berücksichtigt. Diese vereinfachende Vorgehensweise hat zur Folge, daß man die Temperaturabhängigkeit der Brennstoffdichte nur in flächengemittelter Form berücksichtigen kann. Der Fehler in den Temperaturen, der sich dadurch ergibt, dürfte im Bereich von 3 % liegen.

Die Aufheizung von Kühlmittel und Strukturmaterial wird ebenfalls nur entlang der Brennstoffsäule berechnet. Die axiale Einteilung ist äquidistant und kann wegen des geringen Rechenaufwandes feiner gewählt werden als die von Brennstoff und Hülle.

2.2 Temperaturberechnung

a) Lösung der zeitabhängigen Wärmeleitungsgleichung mit der Methode der finiten Differenzen

Ein zentrales Problem für einen transienten Brennstabcode stellt die Lösung der zeitabhängigen Wärmeleitungsgleichung dar. Im Rechencode TRANSIENT wurde als Lösungsmethode die der finiten Differenzen gewählt. Diese Methode läßt sich relativ leicht in einen FORTRAN-Rechencode übertragen, zudem ist sie vielfach erprobt worden. Fehlerabschätzungen sind in der Literatur zu finden.

Zur Behandlung der eindimensionalen zeitabhängigen Wärmeleitungsgleichung:

$$c_p \cdot \rho \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + q \quad (1)$$

welche eine Differentialgleichung vom parabolischen Typ darstellt, gibt es eine Reihe von Differenzenverfahren. In TRANSIENT wird das nach Crank/Nicholson benannte Dreipunktverfahren mit einer Vorwärtsdifferenz für die zeitliche Ableitung verwendet.

In diesem Differenzenschema schreibt sich die Gleichung (1) wie folgt /5/:

$$\begin{aligned} & T_i^{t+\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c_p)_i^t + \Delta t} \left[\lambda_i^{t+\Delta t} \cdot \left\{ \frac{T_{i+1}^{t+\Delta t} - 2T_i^{t+\Delta t} + T_{i-1}^{t+\Delta t}}{(\Delta r)^2} + \frac{T_{i+1}^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}}{2\Delta r \cdot r_i} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\lambda_{i+1}^{t+\Delta t} - \lambda_{i-1}^{t+\Delta t}}{4 \lambda_i^{t+\Delta t}} \frac{T_{i+1}^{t+\Delta t} - T_{i-1}^{t+\Delta t}}{(\Delta r)^2} \right\} + q_i^{t+\Delta t} \right] \\ & = T_i^t + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c_p)_i^t} \left[\lambda_i^t \cdot \left\{ \frac{T_{i+1}^t - 2T_i^t + T_{i-1}^t}{(\Delta r)^2} + \frac{T_{i+1}^t - T_{i-1}^t}{2\Delta r \cdot r_i} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\lambda_{i+1}^t - \lambda_{i-1}^t}{4 \lambda_i^t} \frac{T_{i+1}^t - T_{i-1}^t}{(\Delta r)^2} \right\} + q_i^t \right] \quad (2) \end{aligned}$$

Es werden hierbei die Ableitungen $\frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right)$ an den Zeitpunkten t und $t+\Delta t$ arithmetisch gemittelt.

Um das Verfahren starten zu können, braucht man natürlich die Temperaturverteilung zum Zeitpunkt $t = 0$ als Anfangsbedingung. Hierzu wird in TRANSIENT die stationäre Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) = -q \quad (3)$$

nach einem ähnlichen Differenzenverfahren (Dreipunkt) gelöst. Die zugehörige Differenzgleichung schreibt sich wie folgt:

$$\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{(\Delta r)^2} + \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2\Delta r \cdot r_i} + \frac{\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}}{4\lambda_i} \cdot \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{(\Delta r)^2} = - \frac{q_i}{\lambda_i} \quad (4)$$

Die Differenzgleichungen (2) und (4) sind in dieser Form nur gültig, wenn im betrachteten Gebiet die Stützstellenabstände überall gleich sind. Will man Unterschiede in den Stützstellenabständen zulassen - wie dies in TRANSIENT geschieht -, dann muß man die Ortsableitungen in folgender verallgemeinerter Form ansetzen:

$$\frac{\partial}{\partial r} T \Big|_{r=r_i} = \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{r_{i+1} - r_{i-1}} = \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i} \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} T \Big|_{r=r_i} = 2 \frac{(T_{i+1} - T_i) \Delta r_{i-1} - (T_i - T_{i-1}) \Delta r_i}{\Delta r_{i-1} \cdot \Delta r_i (\Delta r_i + \Delta r_{i-1})} \quad (6)$$

$$\Delta r_{i-1} = r_i - r_{i-1} ; \quad \Delta r_i = r_{i+1} - r_i$$

Das Crank-Nicholson-Verfahren ist ein implizites Verfahren, d.h. die Temperatur an der i-ten Stützstelle kann nicht direkt aus der an der i-1-Stelle berechnet werden, wie bei einem einfachen Schrittverfahren. Durch Anwendung von Gleichung (2) auf alle Stützstellen ($i=1 \dots n$) des Gebietes erhält man ein n-dimensionales Gleichungssystem für die n unbekanntenen Temperaturen $T_1^{t+\Delta t}$ bis $T_n^{t+\Delta t}$. Wenn man Gleichung (2) für $i=1$ und $i=n$ anwendet, dann treten Glieder mit den fiktiven Größen T_0 und T_{n+1} auf. Diese fiktiven Temperaturen lassen sich mit Hilfe der Randbedingungen eliminieren. Darauf wird im einzelnen weiter unten eingegangen.

Da die Materialgrößen C_p , ρ und λ Funktionen der lokalen Temperatur sind, liegt im Grunde ein nichtlineares Gleichungssystem vor. Durch iteratives Vorgehen läßt sich allerdings das Verfahren auf die Lösung eines linearen

Gleichungssysteme reduzieren. Beim ersten Iterationsdurchlauf nimmt man der Einfachheit halber die Stoffwerte zu Ende des letzten Rechenschritts, löst das lineare Gleichungssystem und berechnet sich dann die Stoffwerte für die so ermittelten Temperaturen. Da das Rechenzeitintervall so klein gewählt wird, daß sich die Temperaturen an den Stützstellen nicht sehr stark ändern, kann man die Iteration nach dem 2-ten Lösungsschritt abbrechen.

b) Thermische Kopplung von Brennstoff und Hülle; Randbedingungen

In TRANSIENT werden die Temperaturverteilungen in Brennstoff und Hülle jeweils getrennt für sich berechnet. Zwei Gründe sprechen für dieses Vorgehen. Der Rechenaufwand zur Lösung des Gleichungssystems steigt sehr stark mit dessen Dimensionen an. Bei getrennter Behandlung von Brennstoff und Hülle hat man es dann mit Gleichungssystemen geringerer Dimension zu tun. Dies ist ein mehr rechentechnischer Aspekt. Der 2. Gesichtspunkt betrifft den Wärmedurchgang im Spalt Brennstoff/Hülle. Die Wärmedurchgangszahl h_{gap} ist eine Funktion der Brennstoffrandtemperatur und der Hüllinnentemperatur. Das Gleichungssystem ist damit in jedem Fall nichtlinear und man muß wieder iterativ arbeiten. Dies wird aber dann bei großen Gleichungssystemen sehr zeitaufwendig.

Durch die getrennte Behandlung von Brennstoff und Hülle ergibt sich das Problem der richtigen thermischen Kopplung. In TRANSIENT wird nun folgendermaßen vorgegangen:

1. Man beginnt mit der Berechnung der Temperaturverteilung im Brennstoff mit Stoffwerten, Wärmedurchgangszahl und Hüllinnentemperatur vom letzten Rechenzeitschritt. Als Randbedingungen werden verwendet:

$$-\lambda_f \frac{\partial T^f}{\partial r} \Big|_{r=r_{fa}} = h_{\text{gap}} \Delta T \quad (7a)$$

und

$$\frac{\partial T^f}{\partial r} = 0 \quad \text{für } r = 0 \quad (7b)$$

2. Es folgt die Berechnung der Temperaturverteilung in der Hülle mit den Randbedingungen

$$+\lambda_f r_{fa} \frac{\partial T^f}{\partial r} \Big|_{r=r_{fa}} = +\lambda_H r_{Hi} \frac{\partial T^H}{\partial r} \Big|_{r=r_{Hi}} \quad (8a)$$

und

$$-\lambda_H \frac{\partial T^H}{\partial r} \Big|_{r=r_{Ha}} = h_{sc} (T_{Ha} - T_{cool}) \quad (8b)$$

Die linke Seite der Gleichung (7a) ist nach dem 1. Rechenschritt bekannt, es ist der Wärmestrom, der in die Hülle vom Brennstoff her einfließt.

3. Mit der neuen Hüllinnentemperatur und neuen Wärmedurchgangszahl wird die Temperaturverteilung im Brennstoff neu berechnet.

Die Änderungen der Hülltemperaturen im Rechenzeitschritt sind i.a. klein, verglichen mit den Änderungen der Brennstofftemperaturen, so daß sich eine Iteration bei der Hülle erübrigt.

c) Schmelzen von Brennstoff und Hülle

Um bei Schmelzvorgängen eine aufwendige zwei- oder gar drei-Zonenbehandlung mit einer zeitlichen Verschiebung der Zonengrenzen zu vermeiden, wird das folgende, von Bonacina et al. /5/ vorgeschlagene, einfache Verfahren angewandt.

Wie in /5/ gezeigt wurde, können in einem Finite-Differenzen-Code Schmelzvorgänge durch eine Umdefinition von C_p im betreffenden Temperaturbereich modelliert werden.

Bei einem scharfen Phasenübergang flüssig/fest kann die Schmelzenthalpie E_s , streng mathematisch, in C_p durch eine δ -Funktion über der Schmelztemperatur berücksichtigt werden. Falls man diese δ -Funktion über ein gewisses

Temperaturintervall ΔT_s um die Schmelztemperatur verschmiert, dann läßt sich die neu definierte spezifische Wärme \tilde{C}_p wie folgt ansetzen

$$\begin{aligned} \tilde{C}_p &= C_p && \text{für } T < T_s - \frac{\Delta T_s}{2} \\ \tilde{C}_p &= C_p(T_s) + \frac{E_s}{\Delta T_s} && \text{für } T_s - \frac{\Delta T_s}{2} \leq T \leq T_s + \frac{\Delta T_s}{2} \quad (9) \\ \tilde{C}_p(T) &= C_p^{liq} && \text{für } T \geq T_s + \frac{\Delta T_s}{2} \end{aligned}$$

Aus rechentechnischen Gründen - es sollte mindestens eine Stützstelle im betreffenden Temperaturintervall ΔT_s liegen - darf dieses nicht zu klein gewählt werden. In TRANSIENT kann dieser Wert vom Benutzer vorgegeben werden.

Falls beim Übergang fest/flüssig ein Zweiphasengemisch auftritt, wie z.B. bei Mischoxid und Mischkarbid, dann wird im Grunde durch T_{sol} und T_{liq} schon ein Temperaturintervall definiert. Da dieses Temperaturintervall unter Umständen recht klein werden kann, wird in TRANSIENT schon von vornherein die Schmelzenthalpie über ein größeres Temperaturintervall verschmiert.

Das eben beschriebene, einfache Verfahren eignet sich auch zur Beschreibung von Siedevorgängen im Brennstoff. Hier kommt allerdings erschwerend hinzu, daß die Siedetemperatur vom Systemdruck abhängt.

Die Volumenzunahme durch den Phasenwechsel wird in TRANSIENT in derselben Weise behandelt wie die Schmelzwärme:

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}(T) &= \alpha(T) && \text{für } T < T_s - \frac{\Delta T_s}{2} \\ \tilde{\alpha}(T) &= \alpha(T_s) + \frac{\theta^{ph}}{3 \cdot \Delta T_s} && \text{für } T_s - \frac{\Delta T_s}{2} \leq T \leq T_s + \frac{\Delta T_s}{2} \\ \tilde{\alpha}(T) &= \alpha^{liq} && \text{für } T \geq T_s + \frac{\Delta T_s}{2} \quad (9a) \end{aligned}$$

θ^{ph} ist die Volumendehnung durch Phasenwechsel.

d) Kühlmitteltemperaturen

Die Aufheizung des Kühlmittels während und eventuell nach der Transiente ist eine für die Beurteilung des Brennstabverhaltens sehr wichtige Größe, denn sie ist maßgebend für den zeitlichen Verlauf der Hülltemperaturen.

In TRANSIENT wird die Aufheizstrecke - diese ist in erster Näherung durch die Länge der Brennstoffsäule gegeben - in eine frei wählbare Anzahl (n_{ax}) von axialen Abschnitten eingeteilt. Ermittelt werden die Kühlmitteltemperaturen in den Mittelpunkten dieser Abschnitte. Wenn man den Ursprung der Z-Achse ans untere Ende der Brennstoffsäule legt, dann berechnen sich die axialen Koordinaten dieser Stützstellen wie folgt ($\Delta Z = L_f/n_{ax}$):

$$z_i = \frac{1}{2} \Delta Z + (i-1) \cdot \Delta Z$$

Es seien $\chi(z_i)$ die Werte der linearen Stableistung an diesen axialen Positionen. Dann ergeben sich die zugehörigen stationären Kühlmitteltemperaturen T_{cool} in den Mittenebenen der axialen Zonen wie folgt:

$\hat{T}_{cool,i}$: Temperaturen in den axialen Schnittebenen)

$$\hat{T}_{cool,i} = T_{cool}^{ein} + \frac{1}{\dot{m}} \sum_{j=1}^i \Delta Z \cdot \chi(z_j) / C_{p,j}^{cool}$$

(10)

$$T_{cool,i} = \frac{1}{2} (\hat{T}_{cool,i-1} + \hat{T}_{cool,i})$$

Dabei ist \dot{m} der Massendurchsatz in g/sec und $C_{p,i}^{cool}$ die spezifische Wärme des Kühlmittels im entsprechenden axialen Sektor. Da die spezifische Wärme eine Funktion der Temperatur ist, muß auch hier iteriert werden.

Die Aufheizung des Kühlmittels $\Delta T_{cool,i}$ im Zeitintervall t bis $t + \Delta t$ während der Transiente wird für ein bestimmtes axiales Segment i über die folgende Bilanzgleichung bestimmt:

$$j_i \cdot \Delta z \cdot \Delta t = \Delta z \frac{\dot{m}}{v^{cool}} C_{p,i}^{cool} \Delta T_{cool,i} - \frac{1}{2} v^{cool} (\Delta t)^2 (j_{i-1} - j_i) - \dot{m} \Delta t \cdot (C_{p,i-1}^{cool} T_{cool,i-1} - C_{p,i}^{cool} T_{cool,i}) \quad (11)$$

$$j_i = j_i^{ein} - j_i^{aus}$$

Der Wärmestrom j setzt sich zusammen aus dem Anteil j^{ein} , der von der Hülle ins Kühlmittel einströmt und dem Anteil j^{aus} , der ans Strukturmaterial abgegeben wird. Neben der Enthalpieerhöhung des Kühlmittels im betreffenden axialen Abschnitt werden auf der rechten Seite noch Zu- und Abtransport der Wärmemengen aufgrund der Kühlmittelströmung berücksichtigt.

Eine Herleitung von (11) ist im Anhang zu finden.

e) Wärmeübertragung ans umgebende Strukturmaterial

Das zu betrachtende Strukturmaterial ist durch die Konstruktion des Loops bestimmt. Es wird das Material bis zur ersten thermischen Isolierung bei der Rechnung berücksichtigt.

Während einer Transiente wird die Temperaturerhöhung des Kühlmittels durch Wärmeübertragung an Strukturmaterial gedämpft. In TRANSIENT wird die radiale Temperaturverteilung im Strukturmaterial nicht explizit bestimmt, ermittelt wird nur der Anstieg der mittleren Temperatur. Dies dürfte zur Bestimmung der Wärmeaufnahme durch das Strukturmaterial ausreichend sein.

Der radiale Wärmestrom an einem bestimmten axialen Knotenpunkt kann dann näherungsweise wie folgt berechnet werden:

$$j^{aus} = \frac{2\pi (T_{cool} - \bar{T}_s)}{\ln\left(\frac{r_s}{r_i}\right) / \bar{\lambda}_s + 1 / (h_{sc} \cdot r_i^s)} \quad (12)$$

Falls man die Wärmeverluste aus dem Strukturmaterial vernachlässigt, ergibt sich die Erhöhung der mittleren Temperatur des Strukturmaterials im Rechenzeitintervall Δt zu:

$$F_s \cdot \rho^s \cdot C_p^s \cdot \Delta \bar{T}_s = j^{\text{aus}} \cdot \Delta t \quad (13)$$

Falls man die Höhe der Verluste kennt, kann man eine entsprechende Korrektur bei j^{aus} anbringen.

Es sei j^{verl} der radiale Wärmestrom aus dem Strukturmaterial, dann gilt:

$$F_s \cdot \rho_s \cdot C_p^s \cdot \Delta \bar{T}_s = \Delta t (j^{\text{aus}} - j^{\text{verl}}) \quad (14)$$

F_s : Querschnittsfläche des Strukturmaterials

$$F_s = \Pi (r_a^s - r_i^s)$$

f) Wärmedurchgang im Spalt Brennstoff/Hülle

Die Wärmedurchgangszahl im Spalt Brennstoff/Hülle ist mitbestimmend für den Wärmeabfluß aus dem Brennstoff in die Hülle und ins Kühlmittel und prägt damit speziell bei hypothetischen Leistungsstörfällen ganz entscheidend den zeitlichen Verlauf der Hüll- und Kühlmittelaufheizung.

Zur Berechnung der Wärmedurchgangszahl steht in TRANSIENT ein eigener Modul zur Verfügung, in dem verschiedene Wärmedurchgangsmodelle, einfacher und komplizierter Art, zusammengefaßt sind. Diese Modelle lassen sich über einen Schaltparameter ansprechen. Die Anwendungsbereiche dieser verschiedenen Modelle sind nicht alle deckungsgleich. Der Anwender von TRANSIENT muß also entsprechend den Erfordernissen der Rechnung das geeignete Modell auswählen.

Das einfachste Modell ist nur für den Fall gültig, daß der Spalt zwischen Brennstofftablette und Hüllrohr geschlossen ist. Die Wärmedurchgangszahl h_{gap} wird hierin wie folgt angesetzt:

$$h_{\text{gap}} \begin{cases} = h_{\text{gap}}^0 + h_{\text{gap}}^1 \frac{p_{\text{int}}}{1500} & \text{für } p_{\text{int}} \leq 1500 \text{ N/cm}^2 \\ = h_{\text{gap}}^0 + h_{\text{gap}}^1 & \text{für } p_{\text{int}} > 1500 \text{ N/cm}^2 \end{cases} \quad (15)$$

Die Größen h_{gap}^0 und h_{gap}^1 sind fest vorgegebene Erfahrungswerte ($h_{\text{gap}}^0 = 1$, $h_{\text{gap}}^1 = 0,5$). Die Anwendung dieses einfachen, robusten Wärmedurchgangsmodells ist insbesondere bei Auslegungsrechnungen für milde Überlaststrampen sinnvoll.

Das zweite Wärmedurchgangsmodell ist sowohl bei offenem als auch geschlossenem Spalt dies anwendbar. Falls kein Kontaktdruck vorliegt, ist die Wärmedurchgangszahl gegeben durch /6/

$$h_{\text{gap}} = \frac{\bar{\lambda}_g}{\delta + 1 + \frac{R_a}{\text{ex}}} + h_r \quad (16)$$

Dabei ist h_r der Strahlungsanteil:

$$h_r = \hat{a} \cdot (T_{K,fa} + T_{K,Hi}) (T_{K,fa}^2 + T_{K,Hi}^2)$$

$$\hat{a} = \hat{\sigma} \cdot Fe$$

$$Fe = \left\{ \frac{1}{e_f} + \left(\frac{1}{e_c} - 1 \right) \right\}^{-1} \quad (17)$$

Im Emissivitätsfaktor Fe wurde vereinfachend

$$r_{fa} = r_{Hi} \text{ gesetzt.}$$

Die Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches wird nach /7/ wie folgt angesetzt:

$$\lambda_g = \left(\prod_{i=1}^n \lambda_i^{C_i} \right) \cdot T^{0,79} \quad T \text{ in K} \quad (18)$$

$$\sum_{i=1}^n C_i = 1$$

C_i sind die Gaskonzentrationen der Gasmischung im Spalt.

In Gleichung (18) wird die mittlere Wärmeleitfähigkeit des Gasgemisches eingesetzt, d.h. die Wärmeleitfähigkeit bei der mittleren Spalttemperatur (in K)

$$T_{K,Sp} = 0,5 (T_{K,fa} + T_{K,Hi}) .$$

Die Extrapolationslängen werden nach /6/ berechnet:

$$l_{ex} = 3,75 \frac{2 - 0,827 \cdot \bar{\alpha}}{\bar{\alpha}} \cdot l_m \quad (19)$$

Dabei ist $\bar{\alpha}$ der mittlere Akkommodationskoeffizient für das Gasgemisch und l_m die entsprechende mittlere freie Weglänge. Die Formeln zur Berechnung dieser Größen sind in /6/ zu finden.

Der Einfluß der Rauigkeiten ist durch die Größe R_a berücksichtigt. Nach /8/ gilt:

$$R_a = (R_H + R_f) 1,98 e^{-8,62 \cdot 10^{-4} \cdot p_{int}} \quad (20)$$

Dabei sind R_H und R_f die arithmetisch gemittelten Rauigkeiten von Hülle und Brennstoff.

Die Verbesserung des Wärmedurchgangs mit dem Kontaktdruck wird durch den folgenden Term /6/ berücksichtigt:

$$\frac{\lambda_m \cdot p_{int}}{0,5 \cdot R_a^{1/2} \cdot H} \quad \hat{R}_a = \left(\frac{R_H^2 + R_f^2}{2} \right) \quad (21)$$

Der Kontaktdruck Brennstoff/Hülle ist mit p_{int} bezeichnet.

Das 3. Wärmedurchgangsmodell, das im Unterprogramm WDGAP von TRANSIENT enthalten ist, ist das von Mac Donald und Broughton /9/ entwickelte. Die Wärmedurchgangszahl wird hier bei offenem Spalt wie folgt angesetzt:

$$h_{gap} = (1 - F) h_1 + F h_2 + h_{rad} \quad (22)$$

h_1 : Wärmedurchgangszahl für offenen Spalt

h_2 : Wärmedurchgangszahl für geschlossenen Spalt

Dabei ist F der Anteil der Berührungsfläche. Er berechnet sich nach /8/ folgendermaßen:

$$F = \frac{1}{\left\{ a_1 \left(\frac{\Delta\delta \cdot 100}{d_F} \right)^{a_2} + a_3 \right\}} + a_4 \quad (23)$$

$\Delta\delta$: diametraler Heißspalt

d_F : Durchmesser der Brennstofftablette im Heißzustand

a_1 , a_2 , a_3 und a_4 sind empirische Konstanten, die aus /8/ entnommen werden können.

2.3 Mechanik Brennstoff/Hülle

Zur Berechnung der mechanischen Wechselwirkung von Brennstoff und Hülle durch Differenzdehnung ist in TRANSIENT ein einfaches Dreizonen-Modell implementiert /3/. Dieses Modell stellt speziell bei milden Überlaststrampen eine brauchbare Näherung dar. Falls die Temperaturgradienten über die Hülle sehr groß werden und falls man genauere Untersuchungen wünscht, ist es angebracht, auf das umfangreichere Lösungsverfahren nach der Transfer-Matrizen-Methode zurückzugreifen.

Im Dreizonen-Modell wird der Brennstoff in einen heißen, plastifizierten Innenbereich und einen elastischen äußeren Bereich unterteilt. Dieser tritt mit der Hülle in mechanische Wechselwirkung und kann Spannungen aufnehmen. Die Hülle selber stellt die dritte Zone dar.

Entscheidend für die Brauchbarkeit des Dreizonen-Modells ist die realistische Berechnung der Dicke des mechanisch festen Brennstoffringes. Um diese Größe zu bestimmen, muß die sogenannte Plastizitätstemperatur des Brennstoffs festgelegt werden. Die Isotherme durch die Plastizitätstemperatur definiert die

Grenze zwischen plastischem und elastischem Brennstoffgebiet. Die Plastizitätstemperatur ist stark von der Dehnungsrate abhängig. Sie kann also nicht ein für allemal fest vorgegeben werden, sondern muß für jede Betriebsgeschichte eigens bestimmt werden.

a) Berechnung der Plastizitätstemperatur

Zwei Modelle zur Berechnung der Plastizitätstemperatur sind in TRANSIENT enthalten, nämlich:

1. Ein Modell, das sich an der Übergangstemperatur T_c zwischen sprödem und duktilem Verhalten des Brennstoffs orientiert, hier mit SPDU (spröde-duktil)-Modell bezeichnet.
2. Ein Modell, das auf einem Vorschlag von Gittus /10/ basiert (Gittus-Modell).

SPDU-Modell:

Roberts und Wrona /11/ haben die Übergangstemperatur T_c von sprödem zu duktilem Materialverhalten von Mischoxid-Brennstoffen in Abhängigkeit von der Dehnungsrate $\dot{\epsilon}$ in Biegeversuchen gemessen. Sie haben die folgende Relation gefunden:

$$T_c (^{\circ}\text{C}) = \frac{5,5 \cdot 10^4}{28,6 - \ln \dot{\epsilon}} - 273 \quad (24)$$

Die Dehnungsrate $\dot{\epsilon}$ ist in 1/h einzusetzen.

Oberhalb der Übergangstemperatur fällt die Fließspannung in einem Temperaturbereich von 100 - 200 $^{\circ}\text{C}$ sehr steil ab. Es wird deshalb in TRANSIENT gesetzt:

$$T_{pl} = T_c + \Delta T_{pl},$$

wobei man für ΔT_{pl} Werte zwischen 50 und 150 $^{\circ}\text{C}$ nehmen kann.

Die Übergangstemperatur T_c nach (24) ist in Abb. 2 gegen die Dehnungsrate $\dot{\epsilon}$ aufgetragen. Der Meßbereich von Roberts und Wrona erstreckte sich dabei bis zu Dehnungsraten von ca. 1/h. Bei den Cabri-Experimenten ergeben sich bei den Leistungspulsen Dehnungsraten von bis zu ca. 10^3 /h. Man kommt auf Übergangstemperaturen von ca. 2200 $^{\circ}\text{C}$.

Fraglich ist, ob eine derartig große Extrapolation zulässig ist. Ein Vergleich von gerechneten und gemessenen Hülldehnungsprofilen von Cabri AI1 /3/ zeigte allerdings eine befriedigende Übereinstimmung.

Bei den Messungen von Roberts und Wrona sind die Dehnungen durch von außen aufgeprägte Kräfte verursacht. Um deren Ergebnisse auf die Verhältnisse im Brennstab während einer Transiente zu übertragen, muß man festlegen, wie die Dehnungsrate berechnet werden soll.

Bei einer Transiente werden die Spannungen durch thermische Dehnungen erzeugt. Da nun ab der Plastizitätstemperatur definitionsgemäß eventuelle Überschußdehnungen durch Fließverformungen des Brennstoffs abgebaut werden sollen, gilt:

$$\dot{\epsilon}_{fl} = \dot{\epsilon}_{th}$$

Also kann man in (24) für $\dot{\epsilon}$ einsetzen:

$$\dot{\epsilon}_{th} = \alpha \cdot \frac{\Delta T}{dt} \Big|_{r = r_{pl}}, \quad (25)$$

wobei für den Plastizitätsradius r_{pl} der Einfachheit halber der Wert vom vorigen Rechenzeitintervall genommen wird. Da die Änderung der Plastizitätstemperatur innerhalb der in Frage kommenden kurzen Zeitabläufe nicht reversibel ist, wird noch die folgende Bedingung angewandt:

$$T_{pl}(t + \Delta t) \geq T_{pl}(t) .$$

Gittus-Modell:

Beim Gittus-Modell wird die Plastizitätstemperatur dadurch bestimmt, daß beim entsprechenden Radius die Relaxationszeit durch Brennstoffkriechen gleich der charakteristischen Rampendauer τ gesetzt wird. Da die Wahl einer charakteristischen Rampendauer bei nichtlinearen Rampen etwas kritisch ist, sollte man das Gittus-Modell am besten nur für lineare Rampen anwenden. Für die Prärampen bei den CABRI-Experimenten z.B. scheint es gut geeignet.

Nach /1/ gilt nun:

$$T_{pl} = \frac{Q}{R \cdot \ln(K \cdot E \cdot \tau)} \quad (26)$$

Diese einfache Formulierung erhält man unter der Annahme, daß das Kriechgesetz durch Leerstellendiffusion bestimmt wird:

$$\dot{\epsilon} = K \cdot \sigma \exp(-Q/RT) \quad (27)$$

Bei kleinen Spannungen σ , wie sie im Bereich des Plastizitätsradius vorliegen, dominiert bei oxidischen Brennstoffen dieser lineare Term über den nichtlinearen, der durch Korngrenzgleiten verursacht wird.

Mit /12/

$$\dot{\epsilon} = 1,3 \cdot 10^{15} \exp(-0,46/R T_K) \cdot \frac{\sigma}{T_K a^2} \quad (28)$$

und /13/

$$E = 2,25 \cdot 10^5 (1 - 2,5 P) \left\{ 1 - \frac{T}{2800} \cdot 0,5 + \left(\frac{T}{2800}\right)^2 \cdot 0,2 \right\} \quad (29)$$

wurde die folgende Fitfunktion für T_{pl} gewonnen:

$$T_{pl} = 1872,4 + \hat{\tau}(-88,781 + \hat{\tau}(3,5538 - \hat{\tau} \cdot 0,090438))$$

$$\hat{\tau} = \ln \tau \quad (30)$$

Im Gittus-Modell ist T_{pl} während der Transiente nicht variabel, sondern behält seinen Wert bei. Hierin unterscheidet es sich also vom SPDU-Modell sehr deutlich. Ansonsten bringen in vielen Fällen beide Modelle sehr ähnliche Ergebnisse.

b) Rißmodell im Brennstoff

Nachdem die Plastizitätstemperatur T_{pl} bestimmt ist, kann über die Temperaturverteilung in der Brennstofftablette der Plastizitätsradius berechnet werden und damit die Dicke des mechanisch festen Brennstoffrings und dessen thermische und Schwelldehnung.

In Brennstäben mit niedrigen bis mittleren Abbränden sind nun in den Brennstofftabletten größere Keilrisse vorhanden. Diese Keilrisse können unter bestimmten Umständen Überschußdehnungen des Brennstoffs aufnehmen.

Um dieses Problem in TRANSIENT behandeln zu können, wird die vereinfachende Annahme gemacht, daß die Rißspitzen alle auf einem bestimmten Radius, dem sogenannten Rißausheilungsradius r_{heal} liegen. Dieser Rißausheilungsradius ist im Programmteil für die stationäre Vorbestrahlungsphase bestimmt, ebenso die verfügbare Rißdehnung (tatsächliche Rißbreite abzüglich der totalen Rißrauhigkeit).

Falls nun $r_{pl} < r_{heal}$ ist (siehe Abb. 3), dann können die Risse keinen wesentlichen Beitrag zur Aufnahme der Überschußdehnung leisten. In TRANSIENT wird dann der elastische Brennstoffring vereinfachend als rißfrei angenommen.

Falls $r_{pl} > r_{heal}$ ist, wird, je nachdem ob die Rißdehnung größer oder kleiner als die thermische Differenzdehnung ist, die letztere ganz oder teilweise von den Rissen aufgenommen. Das Kriechverhalten des plastischen Brennstoffrings bestimmt nun, wie schnell die Überschußdehnung in plastische Brennstoffverformung umgewandelt werden kann.

In TRANSIENT wird deshalb ein weiterer Radius r_{pl1} definiert, der die Zone thermischen Brennstoffkriechens begrenzt. Falls $r_{heal} \leq r_{pl1}$ ist, dann erfolgt der Abbau der Überschußdehnung augenblicklich, falls aber $r_{heal} > r_{pl1}$ ist, dann wird die Kriechverformung des Brennstoffrings zwischen r_{pl1} und r_{heal} im Rechenzeitintervall berechnet.

Nach /3/ ist die tangentielle Kriechverformung dieses Brennstoffrings gegeben durch:

$$\Delta \epsilon_t^{f, cr} = - \frac{r_{heal}^2 - r_{pl1}^2}{2 \cdot r_{heal}^2 \ln\left(\frac{r_{heal}}{r_{pl1}}\right)} \Delta \epsilon_{eq} (\sigma_{eff}, 0,5 (T_{pl1} + T_{pl})) \quad (31)$$

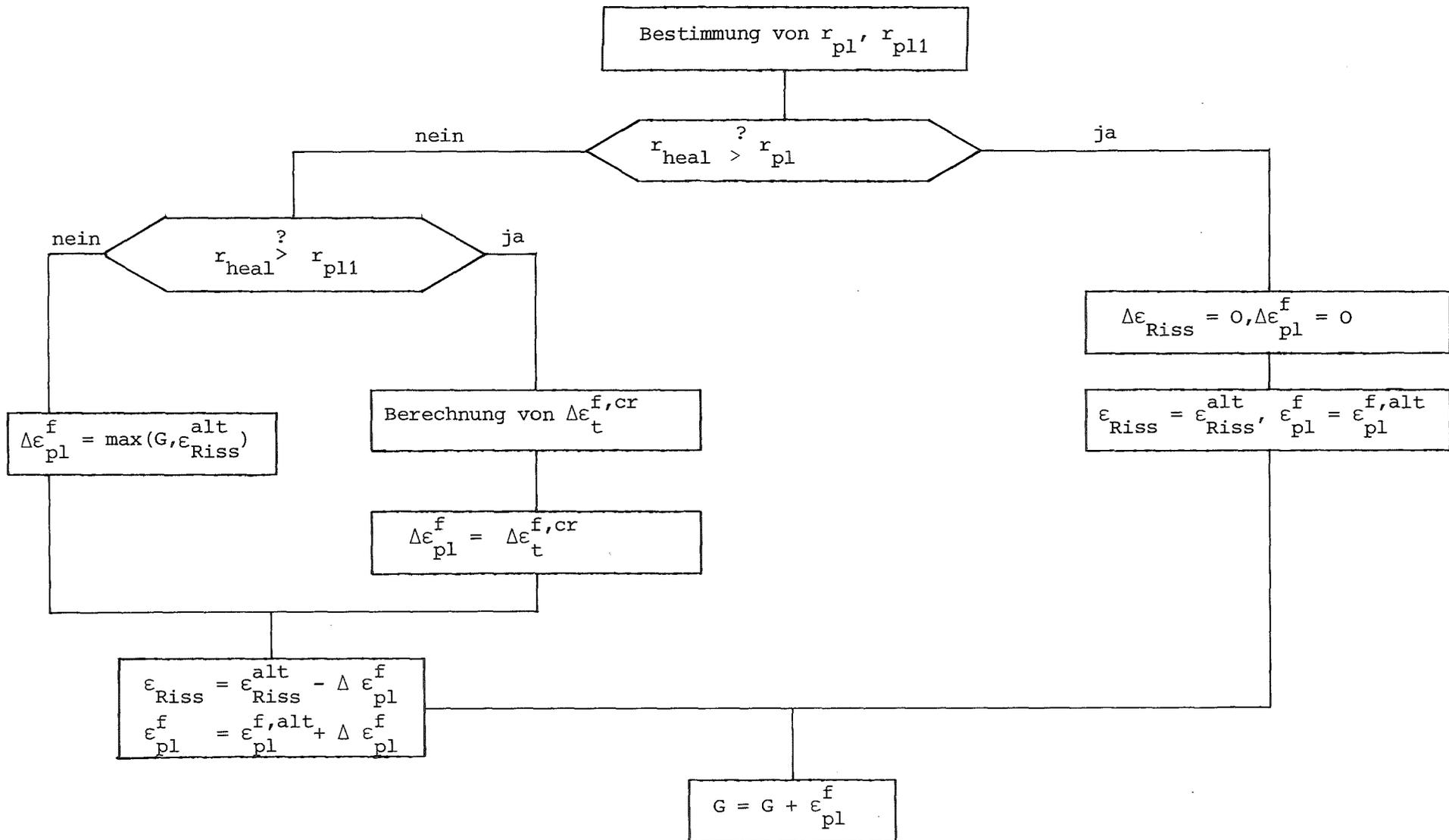
Die mittlere Spannung $\bar{\sigma}$ im Ring zwischen r_{pl1} und r_{heal} ist in guter Näherung gegeben durch

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{2} p_c \frac{r_{fa}}{r_{heal}}$$

Nach /3/ ist in die Kriechformel σ_{eff} wie folgt einzusetzen:

$$\sigma_{eff} = \bar{\sigma} / \ln (r_{heal} / r_{pl1})$$

Zum besseren Verständnis ist im folgenden Flußdiagramm zum Rißmodell der Ablauf der Rechnung nochmals schematisch dargestellt.



Flußdiagramm zum Rißmodell

c) Differenzdehnung Brennstoff/Hülle

Bevor man zur Berechnung des Kontaktdruckes übergehen kann, muß die Differenzdehnung Brennstoff/Hülle ermittelt werden. Nachdem der Plastizitätsradius, die plastische Brennstoffdehnung und die Ribdehnung festliegen, läuft die Rechnung geradlinig durch.

Alle thermischen und Schwelldehnungen werden in TRANSIENT auf den kalten Ausgangszustand, also auf die Referenztemperatur $T = 20 \text{ }^{\circ}\text{C}$ bezogen. Die thermische Verschiebung des elastischen Brennstoffrings ist dann gegeben durch:

$$\Delta r_{th}^f = r_{pl} \int_{T_0}^{T_{pl}} \alpha^f(T) dT + \int_{r_{pl}}^{r_{fa}} \int_{T_0}^{T(r)} \alpha^f(T) dT dr \quad (32)$$

und desgleichen die Verschiebung durch Brennstoffschwellen

$$\Delta r_{sw}^f = r_{pl} \hat{\alpha}_{sw}^f(r_{pl}) + \int_{r_{pl}}^{r_{fa}} \hat{\alpha}_{sw}^f(r) dr \quad (33)$$

Die Ortsintegrale in (32) und (33) werden vereinbarungsgemäß durch Summationen über die Stützringe approximiert.

Die thermische Hüllverschiebung läßt sich in guter Näherung durch den Wert in der Hüllwandmitte approximieren:

$$\Delta r_{th}^H = r_{Hm} \cdot \int_{T_0}^{T_{Hm}} \alpha^H(T) dT \quad (34)$$

Es sei δ_0 der Kaltspalt Brennstoff/Hülle, dann berechnet sich die Differenzverschiebung Brennstoff/Hülle zu:

$$G = \delta_0 + \Delta r_{th}^H + \Delta r_{pl}^H - \Delta r_{th}^f - \Delta r_{sw}^f + \Delta r_{pl}^f \quad (35)$$

Dabei ist Δr_{pl}^H die plastische Hüllverformung, die sich während der Prärampe und eigentlichen Transiente bis zum Zeitpunkt t aufkummuliert hat, und Δr_{pl}^f die entsprechende plastische Brennstoffverformung.

Die Größe G kann sowohl positive als auch negative Werte annehmen. Bei $G < 0$ ergibt sich ein Festkörperdruck Brennstofftablette/Hüllrohr.

d) Kontaktdruck zwischen tragendem Brennstoffring und dem Hüllrohr

Die Berechnung des Festkörperdrucks p_c im System Hüllrohr/tragender Brennstoffring geschieht unter der Annahme des ebenen Spannungszustandes, der für den Grenzfall des unendlich langen Hohlzylinders gültig ist und auch für den vorliegenden Fall eine ausreichende Näherungslösung darstellt /5/. In diesem Falle kann der Verformungszustand des Systems allein durch die radialen und tangentialen Spannungskomponenten beschrieben werden:

$$\varepsilon_{\theta} = (\sigma_{\theta} - \nu \sigma_r) / E \quad (\nu : \text{Querkontraktionszahl, } E: \text{Elast. Modul}) \quad (36)$$

Die Hülle wird nach der Membrantheorie als dünnwandiges, unter Außen- und Innendruck stehendes Rohr behandelt, wobei sich die Tangentialspannung nach der sogenannten Kesselformel berechnet. Diese Näherung ist gerechtfertigt, weil das Verhältnis von Hüllwandstärke/-Durchmesser etwa 1:15 beträgt.

$$\sigma_{t,H} = (p_c - p_{cool}) \frac{r}{s} \quad (37)$$

(p_{cool} : Kühlmitteldruck, s : Hüllwandstärke)

Die Radialspannung berechnet sich nach der Beziehung

$$\sigma_{r,H} = - \frac{1}{2} (p_c + p_{cool}) \quad (38)$$

Im Zylinderkoordinatensystem ergibt sich die radiale elastische Verschiebung u über die allgemein gültige Beziehung

$$\varepsilon_{\theta} = u/r \quad (39)$$

Durch Anwendung der Gleichungen (36) bis (39) erhält man die radiale, elastische Verformung des Hüllrohrs u_H als Funktion des Außen- und Innendruckes:

$$u_H = \left((p_C - p_{cool}) \cdot r_{Hm} / s + v_H / 2 \cdot (p_C + p_{cool}) \right) \cdot r_{fa} / E_H \quad (40)$$

Für den Brennstoffbereich werden die analytischen Lösungen für einen dickwandigen Hohlzylinder unter Außendruck (p_C) und Innendruck (p_{gas}) herangezogen:

$$\sigma_\theta(r) = \frac{(r_{pl}^2 \cdot p_{gas} - r_{fa}^2 p_C + (p_{gas} - p_C) \cdot (r_{fa} \cdot r_{pl} / r)^2)}{(r_{fa}^2 - r_{pl}^2)} \quad (41)$$

$$\sigma_r(r) = \frac{(r_{pl}^2 \cdot p_{gas} - r_{fa}^2 p_C - (p_{gas} - p_C) \cdot (r_{fa} \cdot r_{pl} / r)^2)}{(r_{fa}^2 - r_{pl}^2)} \quad (42)$$

An der Kontaktfläche der Hülle ($r=r_{fa}$) ergeben sich damit die Spannungen:

$$\sigma_{\theta,f} = 2 r_{pl}^2 \cdot p_{gas} / (r_{fa}^2 \cdot r_{pl}^2) - p_C \cdot (r_{fa}^2 + r_{pl}^2) / (r_{fa}^2 - r_{pl}^2) \quad (43)$$

$$\sigma_{r,f} = - p_C \quad (44)$$

Aus den Gleichungen (36), (39), (41) und (42) erhält man die radiale elastische Verformung u_f des tragenden Brennstoffringes als Funktion des Spaltgas- und des Kontaktdruckes:

$$u_f = \left(2 r_{pl}^2 \cdot p_{gas} / (r_{fa}^2 - r_{pl}^2) - p_C \cdot (r_{fa}^2 + r_{pl}^2) / (r_{fa}^2 - r_{pl}^2) + v_f \cdot p_C \right) \cdot r_a / E_f \quad (45)$$

Die Differenz $u_H - u_f$ ist gleich der Differenzdehnung G nach Schließen des Spaltes aus Gleichung (35).

$$G = u_H - u_f \quad (46)$$

Die Gleichungen (40) und (45) werden in Gleichung (46) eingesetzt und die Auflösung nach p_C liefert eine Beziehung, die für die Berechnung des Kontaktdruckes geeignet ist: ($G < 0$)

$$p_C = \frac{\frac{2 r_{pl}^2 \cdot p_{gas}}{(r_{fa}^2 - r_{pl}^2) \cdot E_f} - \left(\frac{v_H}{2} - \frac{r_{Hm}}{s} \right) \frac{p_{cool}}{E_H} - \frac{G}{r_a}}{\frac{(r_{fa}^2 + r_{pl}^2)}{(r_{fa}^2 - r_{pl}^2) E_f} + \left(\frac{v_H}{2} + \frac{r_{Hm}}{s} \right) \frac{1}{E_H} - \frac{v_f}{E_f}} \quad (47)$$

Mit dem bekannten Kontaktdruck p_c wird dann über Gleichung (37) die Hüllrohr-Tangentialspannung berechnet. Dieser Wert wird mit der Fließgrenze des Hüllrohrmaterials σ_g verglichen. Für den Fall, daß $\sigma_{\theta,H} > \sigma_g$ ergibt sich unter Vernachlässigung von σ_r nach dem Kriterium von Tresca eine Fließverformung des Hüllrohrs vom Betrag:

$$\Delta(\Delta \epsilon_{p\ell}^H) = (\sigma_{\theta,H} - \sigma_g) / E_H \quad (48)$$

und damit:

$$\Delta r_{p\ell}^H = \Delta r_{p\ell}^{H,alt} + r_{Ha} \cdot \Delta(\Delta \epsilon_{p\ell}^H) \quad (49)$$

Dieses einfache, ideal elastisch-plastische Hüllrohrmodell ohne Iteration ist gerechtfertigt, da man nur mit kleinen Rechenzeitschritten operiert und folglich die Dehnungsinkremente klein sind. Dies bedeutet, daß sich über einen Rechenzeitschritt der Temperatur- und Spannungszustand im Brennstab nicht sehr stark ändert und damit beim Auftreten von plastischen Verformungen der Hülle die Streckgrenze nur wenig überschritten wird.

Die Dehnungsverfestigung des Hüllrohrs, d.h. der Anstieg von σ_g mit $\Delta \epsilon_{p\ell}$ wird im Moment in TRANSIENT noch nicht berücksichtigt.

2.4 Spaltgasverhalten

Das Spaltgasverhalten in keramischen Brennstoffen ist äußerst komplex und dies sowohl im stationären als auch im transienten Fall. Um aber den Rechenaufwand und die Rechenzeit in Grenzen zu halten (um nicht den für TRANSIENT gesteckten Rahmen zu sprengen), kann man nicht alle Phänomene des Spaltgasverhaltens modellieren und in den Code inkorporieren.

Aus demselben Grund werden auch das stationäre und instationäre Spaltgasverhalten unterschiedlich behandelt. Beim stationären Teil wird nämlich auf ein einfaches empirisches Modell zur Spaltgasfreisetzung zurückgegriffen. Dies ist geboten, weil in TRANSIENT die Vorbestrahlungsphase mehr summarisch abgearbeitet wird. Es wird z.B. nicht der Bestrahlungsaufbau im einzelnen verfolgt, zum ändern scheint das angewandte Verfahren

aber auch zulässig, da das betreffende Modell auf zahlreichen experimentellen Daten basiert und von daher gut abgesichert ist. Des weiteren dürfte im stationären Fall der Endzustand des gebundenen Spaltgases im wesentlichen von der Temperatur, dem Abbrand und der Korngröße abhängen.

Vom stationären Modell wird nur das in den einzelnen Ringen zurückgehaltene Spaltgas geliefert. Die weiteren Eingangsparameter für das instationäre Modell, Aufteilung zwischen Gitter- und Blasenpaltgas und zwischen intra- und intergranularen Blasen sowie die zugehörigen mittleren Blasenradien, sind aus der Literatur entnommen worden /14/.

Für das instationäre Verhalten ist es nicht möglich, auf eine einfache empirische Beschreibung zurückzugreifen, da die bisher bekannten Daten nur einen beschränkten Bereich abdecken und da zum anderen Parameter wie Blasengröße und Blasenverteilung eine wichtige Rolle spielen. Die Verwendung eines Modells auf physikalischer Basis ist also geboten.

Dieses Modell soll zwar die wesentlichen Aspekte des instationären Spaltgasverhaltens enthalten, andererseits aber noch einfach und übersichtlich sein. Diese Forderungen werden durch die im Karlsruher Code LANGZEIT/KURZZEIT /4/ implementierte Beschreibung recht gut erfüllt und deshalb dessen instationärer Teil in den Grundzügen für TRANSIENT übernommen.

a) Stationäre Spaltgasfreisetzung

Die bis zum Abbrand A in einem Brennstoff-Zylinder der Einheitslänge erzeugte Spaltgasmenge/cm³ berechnet sich wie folgt:

$$Z_{\text{erz}} = A \cdot L \cdot \frac{\rho_{\text{th}}}{M} \cdot f_y (1-P) \quad (50)$$

Dabei ist L die Loschmidt-Zahl, ρ_{th} die theoretische Dichte, M das Molvolumen, P die Porosität und f_y die Ausbeute an Spaltgasatomen ($f_y = 0,27 - 0,31$).

Es sei f_{rel} der Freisetzungsfaktor, dann ist die Menge an freigesetztem Spaltgas gegeben durch

$$Z_{\text{frei}} = Z_{\text{erz}} \cdot f_{\text{rel}} \quad (51)$$

und die rückgehaltene Spaltgasmenge:

$$Z_{\text{gesp}} = Z_{\text{erz}} (1 - f_{\text{rel}}) \quad (52)$$

Die wichtigsten Einflußgrößen von f_{rel} dürften die Temperatur, der Abbrand und die Korngröße sein.

Das von Többe, Gehr /15/ für den Rechencode IAMBUS entwickelte Freisetzungsmo-
dell, das in TRANSIENT Verwendung findet, berücksichtigt aller-
dings nur Temperatur und Abbrand. Es basiert aber, wie eingangs erwähnt,
auf einer Analyse von zahlreichen Meßdaten /16/ und ist von daher gut
abgesichert.

In diesem Modell wird die Spaltgasfreisetzung durch folgende einfache
Funktion beschrieben:

$$f_{\text{rel}} = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{A}{A_k} & \text{für } A \leq A_k \\ 1 - \frac{1}{2} \frac{A_k}{A} & \text{für } A > A_k \end{cases} \quad (53)$$

Der kritische Abbrand A_k ist eine Funktion der lokalen Brennstofftempera-
tur T_K^f . Eine "Best-Fit-Analyse" der experimentellen Daten von Zimmermann
/16/ ergab:

$$A_k = 8 \cdot 10^{-2} \exp \left(7500 \cdot \left(\frac{1}{T_K^f} - \frac{1}{1273} \right) \right) \quad \text{für } T_K^f > 1273 \text{ K}$$

$$A_k = 8 \cdot 10^{-2} \quad \text{für } T_K^f \leq 1273 \text{ K} \quad (54)$$

Die gesamte Gasfreisetzung im betrachteten Brennstoffquerschnitt erhält
man durch Summation über die Brennstoffringe

$$Z_{\text{frei}}^Q = \sum_i Z_{\text{frei}} \cdot \Delta F_i \quad (55)$$

und die aus der gesamten Brennstoffsäule durch Summation über die axialen
Sektoren

$$Z_{\text{frei}}^{\text{tot}} = \sum_e Z_{\text{frei}}^Q \cdot \Delta l_z \quad (56)$$

Nach Umrechnung in Volumeneinheiten

$$V_{\text{frei}} = Z_{\text{frei}}^{\text{tot}} \cdot \frac{V_{\text{Mol}}}{L} \quad (57)$$

kann dann der Gasdruck im Plenum ermittelt werden

$$p_{\text{gas}} = p_{\text{ein}}^T \frac{V_0 + V_{\text{frei}}}{V_0} \quad (58)$$

und entsprechend die verschiedenen Gasanteile (siehe z.B. /17/).

b) Eingabeparameter für das instationäre Modell

Das in TRANSIENT implementierte instationäre Spaltgasmodell setzt die Kenntnis verschiedener Parameter wie mittlere Blasenradien, Blasendichte usw. voraus, um die Rechnung starten zu können. Diese Daten werden vom Többe/Gehr-Modell nicht geliefert und müssen gesondert bereitgestellt werden.

Zur Festlegung aller zum Zeitpunkt $t=0$ benötigten Ausgangswerte reicht der folgende Datensatz aus:

1. FRATIO: Anteil des Gitterspaltgases am gebundenen Spaltgas.
2. FBRATO: Anteil des intragranularen Blasengases am gesamten Blasengas.
3. BLR: Mittlerer Radius der intragranularen Blasen.
4. BLO: Mittlerer Radius der intergranularen Blasen.
5. GKO: Radius des Innencores vom Korn.
6. DELKG: Wandstärke der Schale um das Korn.

c) Transientes Spaltgasverhalten

Nach der Ermittlung der Spaltgasfreisetzung und Spaltgasrückhaltung für die stationäre Vorbestrahlungsphase und der Vorgabe der benötigten Eingangsparameter kann die Berechnung des transienten Spaltgasverhaltens erfolgen.

Nach /18/ liegt der Schlüssel zur adäquaten realistischen Modellierung des transienten Spaltgasverhaltens in der Analyse der zeitlichen Entwicklung der mittleren Blasengröße im Brennstoff in Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen und dem Temperaturverlauf während der Transiente. Eine vereinfachende Beschreibung der zeitlichen Entwicklung mit Hilfe von wenigen Differentialgleichungen für die Mittelwerte, die die Blasenpopulation charakterisieren, sollte dementsprechend ausreichend sein, um die Auswirkungen auf das Brennstabverhalten zu erfassen.

Dieser Weg wurde bei der Entwicklung des KfK-Codes LANGZEIT/KURZZEIT /4/ beschritten. Die wesentlichen Elemente dieses Codes umfassen die Beschreibung der Blasenpopulation durch die Unterscheidung zwischen inter- und intragranularen Blasen, die Änderung der Blasenradien durch Aufnahme von Gitterspaltgas und Koaleszenz, die Wanderung von intragranularen Blasen zu den Korngrenzen und die von intergranularen Blasen zu den Kornkanten.

Die wesentlichen Grundzüge dieser Modellierung wurde für TRANSIENT übernommen, allerdings wurden noch eine Reihe von Vereinfachungen vorgenommen.

In der jetzigen Version von TRANSIENT wird nur das intragranulare Gas detaillierter behandelt, nicht aber das intergranulare. Es wird vereinfachend angenommen, daß alles Blasengas in den Korngrenzen (auch das aus dem Korn freigesetzte) in Form großer Korngrenzenblasen vorliegt, d.h. das ganze Blasengas an den Korngrenzen soll zum Druckaufbau in der Schmelze beitragen. Dies scheint für den gegenwärtigen Anwendungsbereich des Codes (Cabri TOP's bis zum Stabversagen) ausreichend. Es ist aber für die Zukunft geplant, eine detaillierte Modellierung des intergranularen Gases zu implementieren.

Nach /18/ dominieren während der Transiente die thermischen Effekte: Spaltgas wird sehr viel schneller in den Blasen ausgeschieden als durch Resolution wieder ins Gitter zurückgetrieben. Aus diesem Grund wurde der letztere Effekt nicht berücksichtigt. Weiterhin wird die Diffusion des Gitterspaltgases zu den Korngrenzen gegenüber der Wanderung von Blasen vernachlässigt.

Es sei:

$$\begin{aligned}
 c_K &= \text{Konzentration von Gitterspaltgas im Korn in} \\
 &\quad \text{A/cm}^3 \quad (A \hat{=} \text{Atome}) \\
 \eta_K &= \text{Blasendichte im Korn (Blasen/cm}^3) \\
 r_K &= \text{mittlerer Radius der Blasen im Korn} \\
 b_K &= \text{Konzentration des Blasengases im Korn in} \\
 &\quad \text{A/cm}^3
 \end{aligned}$$

Unter den weiter oben dargelegten Vereinfachungen wird dann das Spaltgasverhalten im Korn wie folgt beschrieben:

1. Die zeitliche Entwicklung des Gitterspaltgases /19/:

$$\begin{aligned}
 \dot{c}_K &= -4\pi D_g \cdot r_K \cdot \eta_K \cdot c_K - \pi r_K^2 v_K \eta_K \cdot c_K \\
 &\quad - \frac{6 \Delta^4 D_s \cdot \eta_K \cdot c_K}{r_K^3} \qquad (59)
 \end{aligned}$$

$$v_K = \frac{4\pi r_K^3 \cdot D_b \cdot Q_s \cdot \nabla T_s}{3 \Omega \cdot k \cdot T_K^2}$$

$$D_b = \frac{3 v_O \Omega^2 \cdot D_s}{2 \pi r_K^4} \qquad v_O = \Omega^{-2/3}$$

v_K : Blasengeschwindigkeit durch Oberflächendiffusion in einem Temperaturgradienten

D_b : Diffusionskoeffizient für intragranulare Blasen

Δ : Oberflächendiffusions-Schichtdicke

Ω : Atomvolumen

Der erste Term von (59) beschreibt die Ausscheidung von Spaltgas in stationären Blasen durch Diffusion im Gitter /4/, die folgenden beiden Terme betreffen die Gasausscheidung in Blasen durch Blasenwanderung /19/ (Sweeping-Effekt) und zwar durch gerichtete und ungerichtete Blasenwanderung.

2. Die zeitliche Entwicklung der Blasendichte /4/:

$$\dot{n}_K = - \frac{4 \Pi v_O \Omega \eta_K^2 D_S Q_S \nabla T_S}{k T_K^2} - \frac{12 v_O \Omega^2 \eta_K^2 \cdot D_S}{r_K^3} \quad (60)$$

$$\nabla T_S = \frac{3}{2} \nabla T$$

Der erste Term wird durch gerichtete Blasenwanderung im Temperaturgradient und der zweite durch stochastische Blasenwanderung verursacht.

Hinman und Randklev /20/ haben neuerdings darauf hingewiesen, daß die treibende Kraft durch Druckgradienten im Korn, die durch den Aufbau von Überdrücken in Blasen im Korninnern erzeugt werden, wahrscheinlich wesentlich größer ist (Faktor 25) als die durch den Temperaturgradienten. Mit dieser Hypothese könnte man erklären, warum die äußere Schale des Kornes gleichmäßig von Gasblasen entblößt ist; ein experimenteller Befund, der durch sorgfältige Auswertung der Mikrostruktur von Brennstoffen gewonnen wurde. Durch Blasenwanderung im Temperaturgradienten kann dieser Befund nicht gedeutet werden /20/.

Der Aufbau von ausreichenden Druckgradienten im Korn dürfte allerdings einige Zeit in Anspruch nehmen und die frühe Phase der Spaltgasentwicklung ist damit sicher noch durch den Temperaturgradienten dominiert. Das gegenwärtige Modell scheint also zur Beschreibung schneller TOP's des Cabri-Typs bis zum Stabversagen ausreichend zu sein. Für weitergehende Anwendungen (z.B. langsame Transienten) muß allerdings in Zukunft das Spaltgasmodell verbessert werden.

3. Die zeitliche Entwicklung des mittleren Blasenradius:

$$\dot{r}_K = \frac{r_K}{3} \cdot \frac{\dot{\eta}_K}{\eta_K} + \frac{2 \cdot \gamma \cdot D_u \cdot \Omega}{r_K^4 \cdot k \cdot T_K} \cdot \frac{r_z}{r_z - r_K} \cdot (r_{eq}^3 - r_K^3) \quad (61)$$

$$r_z = \sqrt[3]{r_K^3 + \frac{3}{4\pi\eta_K}}$$

$$r_{eq} = \sqrt[3]{r_{K,0}^3 + W \cdot \frac{b_K}{\eta_K}}$$

$$r_{K,0} = \sqrt[3]{\frac{3 T_K \cdot b_K \cdot k}{\eta_K \cdot 8\pi \cdot \gamma}}$$

Der erste Term beschreibt die Änderung infolge Blasenkoaleszenz und der zweite Term die Änderung infolge Leerstellendiffusion /21/.

4. Zeitliche Entwicklung der Konzentration des Blasengases:

$$\dot{b}_K = - \dot{c}_K \quad (62)$$

Diese Gleichung folgt aus der Vernachlässigung der Spaltgasproduktion und der Gasatom-Diffusion zu den Korngrenzen.

Die Gleichungen (59), (60) und (61) werden mit dem Runge-Kutta-Verfahren gelöst. Der Zeitschritt Δt wird einmal gekürzt, falls man unsinnige Funktionswerte erhält. Führt diese Zeitschrittkürzung nicht zum Ziel, dann wird die Berechnung des transienten Spaltgasverhaltens beendet und der entsprechende Modul wird nicht mehr angesprochen.

Nach /18/ hat bis zum Zeitpunkt t die Blase den Weg $s_K(t)$ zurückgelegt:

$$s_K(t) = \int_0^t v_K(t') dt'$$

Die Fraktion der Blasen, die die Korngrenze erreicht haben, ergibt sich dann zu /4/:

$$F_R(t) = \left\{ \frac{s_K(t)}{4a} \left(3 - \frac{s_K(t)^2}{4a^2} \right) \right\} \quad \text{für } s_K \leq 2a \quad (63)$$

$$F_R(t) = \left\{ s_K(t) \left(3 - \frac{s_K(t)^2}{4a^2} \right) \right\} \quad \text{für } s_K > 2a$$

Die Schwellung im Korn (während der Transiente) berechnet sich zu:

$$s_K(t) = \frac{4\pi}{3} \left| r_K^3(t) \eta_K(t) (1 - F_R(t)) - r_K(0)^3 \cdot \eta_K(0) \right| \quad (64)$$

Unter der konservativen Annahme, daß sich der Radius der intergranularen Blasen nicht ändert und folglich das an die Korngrenzen freigesetzte Spaltgas neue Korngrenzenblasen bildet, ergibt sich die Schwellung in den Korngrenzen zu:

$$s_{KG}(t) = s_{KG}(0) \left(\frac{b_{KG}(t)}{b_{KG}(0)} - 1 \right) \quad (65)$$

und die gesamte Schwellung

$$s_{tot}(t) = s_K(t) \cdot VG_K + s_{KG}(t) \cdot VG_{KG} \quad (66)$$

Die Faktoren VG sind Volumenwichtungs-Faktoren von Korn und Korngrenze.

d) Transiente Gasfreisetzung aus dem Brennstoff in die freien Volumina

Wenn die Flächenbelegung der Korngrenzen einen bestimmten Wert erreicht, dann sind genug durchgehende Blasen- und Porenkanäle im Brennstoff vorhanden, daß das Spaltgas an den Korngrenzen zu den freien Volumina - Spalt, Zentralkanal und Gasplena - transportiert werden kann.

Nach /22/ kann dieser Gastransport grob vereinfachend durch eine Zeitkonstante beschrieben werden. Diese Zeitkonstante kann aus der Kontinuitätsgleichung für niedrige Transportgeschwindigkeiten in einem porösen Medium /23/ abgeleitet werden. Die Differentialgleichung lautet:

$$\frac{\partial p_g}{\partial t} = \frac{1}{P} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{Bo}{\mu_g} \frac{\partial p_g}{\partial z} \right) \quad (67)$$

- ρ_g = Dichte des Gases
- P = Porosität
- B₀ = Permeabilität
- μ_g = Viskosität des Spaltgases

In /22/ wird dann folgende Zeitkonstante für den Gastransport angegeben:

$$t_R = \frac{22,5 \cdot \mu_g}{p_{tr} - p_{gas}} \cdot \left(\frac{q \cdot \hat{L}}{2a} \right)^2 \frac{1-P}{P} \quad (68)$$

- p_{tr} = transienter Gasdruck im Brennstoffsegment
- q = Tortuosität = mittlere Transportlänge/Brennstoffabmessung
(1,4 \lesssim q \lesssim 20)
- \hat{L} = Brennstoffabmessung

In /22/ wird für \hat{L} die Länge der Brennstoffsäule eingesetzt, falls aber ein Zentralkanal existiert, scheint es eher angebracht, für \hat{L} den Tabletendurchmesser zu nehmen.

Die Temperaturabhängigkeit von μ_g lautet nach /22/:

$$\mu_g(T_K) = 71,2 \cdot 10^{-7} T_K^{0,65} \quad (69)$$

2.5 Druckaufbau in der Brennstoffschmelze

Eine der Hauptursachen für das Stabversagen bei hypothetischen Störfällen und hier speziell bei Leistungstransienten ist der Druckaufbau in der Brennstoffschmelze. Seine Modellierung ist also für einen transienten Brennstabcode unabdingbar.

In TRANSIENT wird hierzu auf die Vorstellungen des Modells der Gasflasche zurückgegriffen, d.h. die Zone flüssigen Brennstoffs wird wie eine Flüssigkeit in einer Flasche behandelt, eine Flüssigkeit, die noch zusätzlich Gas in Lösung und in Form von großen und kleinen Blasen enthält. Die feste Wandung der "Flasche" bildet der mechanisch feste Brennstoffring und

die Hülle. Wesentlich für den Aufbau eines großen Schmelzdruckes ist, daß Brennstoff und Hülle im oberen Teil der Brennstoffsäule verspannt sind (no-slip-Bedingung), die Flasche nach oben hin also abgeschlossen ist.

Der Druck in der Schmelzzone wird als gleichförmig angenommen, nicht aber die Brennstofftemperatur und die Dichte. Die Grenze der Zone mit hydrostatischem Spannungszustand, die wir in Anlehnung an die englischsprachige Literatur mit Schmelzkavität bezeichnen wollen, ist durch eine Isotherme gegeben. Gemeinhin wird hierfür die Solidus-Temperatur genommen /24, 25/.

Da der Brennstoff schon unterhalb der Schmelztemperatur äußerst plastisch ist, kann man den Standpunkt vertreten, daß eine Temperatur etwas unterhalb von T_{sol} geeigneter ist. In TRANSIENT kann diese Grenztemperatur vom Benutzer gewählt werden; diese Option erhöht die Flexibilität des Codes.

Ein zum Stabversagen führender Druck wird sich in der Schmelzkavität erst dann aufbauen, wenn das verfügbare Leervolumen erschöpft ist. Aus dem Grund wird in TRANSIENT der Druckaufbau über eine Volumenbilanz bestimmt.

$$\begin{aligned}
 V_{void} = & \Delta V_{th}^f - \Delta V_{th}^H - \Delta V_{pl}^H - \Delta V_{ax}^f \\
 & + V_{gas} - \Delta (\Delta V_{pl}^H) - \Delta V_{trp}
 \end{aligned}
 \tag{70}$$

Zum verfügbaren Leervolumen V_{void} tragen der Spalt Brennstoff/Hülle, der Zentralkanal, die Brennstoffrisse und das Porenvolumen im plastischen Brennstoffgebiet bei und zwar summiert über die betreffenden axialen Sektionen. V_{void} berechnet sich also wie folgt:

$$V_{void} = V_{smear} - \Delta V_{pre,sw}^f + \Delta V_{pre,pl}^H - V_{por,el}^f
 \tag{71}$$

V_{smear} = Leervolumen bei der Fertigung

$\Delta V_{pre,sw}^f$ = Volumenverbrauch durch Festkörperbrennstoffschwellen bei der Vorbestrahlung

$$\Delta V_{pre,pl}^H = \text{Volumenzuwachs durch bleibende Hüllverformung bei der Vorbestrahlung (Schwellen und plastische Verformung)}$$

$$V_{por,el}^f = \text{Porenvolumen im elastischen Brennstoffgebiet}$$

Die Terme auf der rechten Seite von Gleichung (70) haben die folgende Bedeutung:

$$\Delta V_{th}^f = \text{Volumenverbrauch durch thermische Dehnung und Schmelzdehnung des Brennstoffs}$$

$$\Delta V_{th}^H = \text{Volumenzuwachs durch thermische Hülldehnung}$$

$$\Delta V_{pl}^H = \text{Volumenzuwachs durch plastische Hülldehnung bis zum Zeitpunkt } t \text{ in der Transiente}$$

$$\Delta V_{ax}^f = \text{Volumenzuwachs durch axiale Dehnung der Brennstoffsäule}$$

$$V_{gas} = \text{Volumen, das von den großen Gasblasen und dem Poren- gas beansprucht wird (das Volumen der kleinen Blasen wird vernachlässigt)}$$

$$\Delta(\Delta V_{pl}^H) = \text{Volumenzuwachs durch plastische Hülldehnung im Zeitschritt } t \rightarrow t + \Delta t$$

$$\Delta V_{trp} = \text{Volumen der aus der Kavität transportierten Brennstoffschmelze}$$

Nur die Terme V_{gas} , $\Delta(\Delta V_{pl}^H)$ und ΔV_{trp} sind vom zu berechnenden Druck abhängig.

Es sei η_{lb} die Zahl der Gasatome in großen Blasen und in Poren, dann gilt unter der Annahme des idealen Gasgesetzes:

$$V_{gas} = \frac{\eta_{lb} \cdot k \cdot \bar{T}_{Kav}}{p_{Kav}} \quad (71)$$

Für große Blasen kann der Beitrag der Oberflächenspannung vernachlässigt werden. Das Volumen ist im wesentlichen vom äußeren Druck bestimmt.

Der Modul MPRESS, in dem der Druckaufbau in der Schmelze berechnet wird, besteht aus 3 Teilen. Im ersten Teil wird die Ausdehnung der Schmelzkavität und das Gasinventar berechnet. Im zweiten Teil wird der Druck p_{Kav} ausiteriert. Dabei wird zuerst abgefragt, ob das Überschußvolumen durch Kriechdehnung der Hülle im betreffenden Rechenzeitintervall kompensiert werden kann. Wenn dies der Fall ist, wird der zugehörige Druck durch Iteration ermittelt.

Im andern Fall muß das Überschußvolumen durch Fließverformung der Hülle ausgeglichen werden. Diese Fließverformung wird in dem axialen Sektor mit der niedrigsten Hüllfließspannung aufgebracht. Nachdem p_{Kav} ermittelt ist, wird das im Zeitintervall aus der Kavität durch den Zentralkanal transportierte Volumen V_{trp} berechnet.

Im dritten Teil von MPRESS wird nach Eintritt des Stabschadens der Brennstoffaustrag bestimmt. Da in TRANSIENT aber noch keine Modelle zur Berechnung der Druckstöße im Kühlkanal infolge Wechselwirkung zwischen flüssigem Brennstoff und Kühlmittel enthalten sind, ist das Austragungsmodell von der Seite noch nicht geschlossen.

2.6 Brennstofftransport im Zentralkanal

Der Transport flüssigen Brennstoffs im Zentralkanal oder in vorgefertigten zentralen Bohrungen kann einiges zur Druckentlastung in der Schmelze beitragen. Seine Modellierung folgt dem in /26/ vorgeschlagenen Verfahren.

Durch Integration der ein-dimensionalen Impulsgleichung für variablen Strömungsquerschnitt $F(z)$

$$\frac{1}{F(z)} \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot F(z) \cdot u) + \frac{1}{F(z)} \frac{\partial}{\partial z} (\rho \cdot F(z) \cdot u^2) + \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{4f}{D} \cdot \rho \frac{|u| \cdot u}{2} = 0 \quad (72)$$

erhält man unter der Annahme, daß die Flüssigkeit inkompressibel ist:

$$W = \rho \cdot F \cdot u = \text{const} \quad (73)$$

die folgende Beziehung für \dot{w} über einen Pfropfen:

$$\dot{w} = \frac{\Delta p - \frac{w^2}{2\rho} \left[\int_{z_1}^{z_2} d \left(\frac{1}{F(z)^2} \right) + \frac{|w|}{w} \int_{z_1}^{z_2} \frac{4f}{D \cdot F(z)^2} dz \right]}{\int_{z_1}^{z_2} \frac{dz}{F(z)}} \quad (74)$$

- Δp = $p_{z1} - p_{z2}$
- p = Druck
- $F(z)$ = Strömungsquerschnitt
- u = Geschwindigkeit der Flüssigkeit
- f = Reibungsfaktor
- D = hydraulischer Durchmesser

Wie in /26/ wird laminare Strömung angenommen:

$$f = \frac{16}{Re} \quad Re = \frac{D \cdot |w|}{u \cdot F} \quad (75)$$

Die Integrale in (74) werden durch Summationen über die axialen Sektionen ersetzt. Da nun $F_{melt} \gg F_{ZK}$ sind diese Summationen weitgehend durch den Zentralkanalbereich dominiert. Es ist deshalb nicht entscheidend, wo man die Integrationsgrenze in der Schmelzkavität hinlegt.

In TRANSIENT ist noch kein Kriterium für das Ausfrieren der Schmelze im Zentralkanal implementiert, wohl aber eine entsprechende Option (IFROZ). Bei IFROZ = 0 kann die Schmelze den ganzen Zentralkanal ausfüllen, der Transport hört erst auf, wenn seine Enden erreicht sind. Falls IFROZ = 1, dann wird der Transport beendet, sobald eine fest vorgegebene Höhe erreicht ist.

2.7 Brennstoffaustrag in den Kühlkanal nach Eintritt des Stabschadens

Zur Berechnung des Brennstoffaustrages wird die instationäre Bernoulli-Gleichung in der in /27/ angegebenen Form verwendet:

$$L_{\text{eff}} \frac{d v_e}{d t} + \frac{1}{2} v_e^2 = \frac{1}{2} v_\infty^2 \quad (76)$$

L_{eff} = effektive Trägheitslänge des ausgestoßenen Brennstoffs

v_e = Ausstoßgeschwindigkeit

Die asymptotische Ausstoßgeschwindigkeit v_∞ berechnet sich unter Vernachlässigung des Zentralkanalgases zu:

$$v_\infty = \frac{p_{\text{Kav}}}{\rho_m} \left[- f_v^g \cdot \ln \left(\frac{p_e}{p_{\text{Kav}}} \right) + f_v^m \left(1 - \frac{p_e}{p_{\text{Kav}}} \right) \right] \quad (77)$$

f_v^g = Volumenanteil des Gases in der Schmelzkavität

f_v^m = Volumenanteil des Brennstoffs in der Schmelzkavität

p_e = Druck an der Austrittsöffnung ($p_e = p_{\text{cool}}$)

Die Differentialgleichung (76) wird in TRANSIENT nach dem Runge-Kutta-Verfahren gelöst.

3. Programmbeschreibung

3.1 Aufbau des Rechenprogramms

Bei der Entwicklung von TRANSIENT wurde das Ziel verfolgt, den Code in Modulstruktur aufzubauen, d.h. es wurde eine weitgehende Aufsplittung in Unterprogramme angestrebt. In TRANSIENT sind z.B. neben dem eigentlichen Hauptprogramm noch 52 Unterprogramme enthalten. Eine Liste der Unterprogramme ist im Anhang enthalten mit stichwortartiger Erläuterung ihrer Funktionen im Code.

Die Unterprogramme lassen sich grob in drei Gruppen einteilen:

1. Gruppe: Unterprogramme zur Lösung von Gleichungen und physikalischen Phänomenen: Temperatur-, Spannungs-, Spaltgasverteilung.

2. Gruppe: Unterprogramme zur Beschreibung des Materialverhaltens.

3. Gruppe: Bilanzen, Tests der Rechenverfahren.

Die Modulstruktur hat den großen Vorteil, daß z.B. relativ leicht Materialdaten und Lösungsverfahren ausgetauscht werden können.

Der Aufbau von TRANSIENT ist aus dem folgenden Flußdiagramm ersichtlich (Abb. 4), wo die wesentlichen Schritte im Programm aufgeführt sind. Die wichtigsten Unterprogramme, die hierbei jeweils aufgerufen werden, sind explizit bei den entsprechenden Programmblöcken hinzugefügt.

Das Hauptprogramm zerfällt in drei Teile unterschiedlicher Funktion und Bedeutung. In jedem dieser drei Programmteile wird die Schleife über die axialen Sektionen durchlaufen. Außerhalb dieser Schleife liegen nur die Programmteile, die den ganzen Stab betreffen, wie Gasdruck im Plenum, Betriebsbedingungen, Kühlmitteltemperaturprofile usw.

Im 1. Teil wird eine eventuell vorhandene Vorbestrahlung behandelt. Berechnet werden dabei die Umstrukturierung des Brennstoffs sowie Spaltproduktion, Spaltgasrückhaltung und Spaltgasfreisetzung. Ebenso werden die für das transiente Spaltgasmodell benötigten Ausgangswerte wie mittlere Blasenradien, mittlere Blasendichten, Aufteilung in Gitter- und Blasenplattgas usw. festgelegt.

Unter Umständen sind die Neutronenfluß-Bedingungen der Vorbestrahlung verschieden von denen während der Transiente. Der zugehörige Steuerparameter ist mit IREAC bezeichnet.

Im 2. Teil wird der Ausgangszustand für $t = 0$ in der Brennstabscheibe und im Kühlkanal entlang der Brennstoffsäule bestimmt. Begonnen wird mit dem Temperaturprofil im Kühlkanal ($AXFL\emptyset$), dann folgt die Berechnung der Hülltemperaturen. Beide Verteilungen hängen unter anderem nur von der linearen Stableistung bzw. deren axialer Verteilung ab, nicht aber von den Brennstofftemperaturen und vom Wärmedurchgang Brennstoff/Hülle. Sie können also vorweg bestimmt werden.

Die Temperaturverteilung im Brennstoff, der Wärmedurchgang im Spalt und die Spaltbreite müssen ausiteriert werden (Iterationsparameter ISTAT).

5 Iterationen haben sich bisher als ausreichend erwiesen. Was den Spalt Brennstoff/Hülle anbetrifft, so stehen zwei Optionen zur Verfügung:

- 1. Option: Kaltspalt ist vorgegeben
(IGAPCL = 0)
- 2. Option: Heißspalt geschlossen
(IGAPCL = 1)

Die 1. Option kommt insbesondere bei frischen Brennstäben zur Anwendung; die 2. Option bei vorbestrahlten Brennstäben.

Die Ausiteration von Brennstofftemperaturen und Wärmeleitfähigkeiten wird intern im entsprechenden Lösungsmodul TEMPF bewerkstelligt. Deshalb tritt hierzu im Hauptprogramm keine Iterationsschleife auf.

Falls die Prärampe stufenweise berechnet wird (IRAMP = 1), entfällt die Iteration über den Spalt Brennstoff/Hülle und der entsprechende Programmteil wird übersprungen. Der Brennstabzustand bei $t = 0$ wird dann im Unterprogramm PRERAM berechnet.

Im 3. Programmteil wird dann die eigentliche Transiente behandelt. In jedem neuen Rechenzeitintervall werden in LEIKU die aktuellen Werte der linearen Stableistung auf Höhe des Maximums und der Massendurchsatz berechnet.

Zur Bestimmung der Wärmedurchgangszahl werden für die benötigten Eingangsgrößen, wie Hüllinnen- und Brennstoffrandtemperatur sowie die Spaltbreite, die Werte des vorhergehenden Rechenzeitintervalls genommen und auf eine Iteration verzichtet. Dies ist gerechtfertigt, da das Rechenzeitintervall so klein gewählt ist, daß sich Temperaturen und Geometrie von einem Rechenzeitschritt zum andern nur wenig ändern. Iteriert wird über die thermische Kopplung Brennstoff/Hülle und über die Wärmeleitfähigkeiten im Brennstoff.

Nach der Bestimmung von Brennstoff- und Hülltemperaturen läuft die Rechnung ziemlich geradlinig weiter. Es werden Brennstoff-Plastizität und -Schmelzen behandelt sowie das transiente Spaltgasverhalten. Das letztere liefert als wesentliches Ergebnis transiente Spaltgasfreisetzung und transientes Brennstoffschwellen. Danach können die Dehnungen von Brennstoff und Hülle bestimmt werden und anschließend der Spalt und die Differenzdehnung als Eingangsgröße für die Brennstoff/Hüllrohr-Mechanik.

Es folgen dann die Energie- und Wärmestrombilanzen und die Ermittlung der Grenzen der Schmelzkavität und des darin enthaltenen Gasinventars.

Nach Beendigung der axialen Schleife kommen dann die Programmteile, die die Brennstoffsäule bzw. den Brennstab als ganzes betreffen, als da sind Druckaufbau in der Brennstoffschmelze, Brennstoffaustrag und Temperaturprofile von Kühlmittel und Strukturmaterial.

3.2 Organisation der Ein- und Ausgabe

Der Rechencode TRANSIENT ist zum gegenwärtigen Zeitpunkt unter der Bezeichnung TRANS.FORT als FORTRAN-Datei auf der TSO-Platte gespeichert. Die vom Code benötigten Eingabewerte werden in der SUBROUTINE INOUT eingelesen und danach (auch alle) ausgeschrieben.

Die Eingabewerte sind in der Datei INP.DATA enthalten. Um also einen Rechenlauf durchzuführen, muß diese Datei erst erstellt bzw. geändert werden. Die Ausgabe wird in die drei Dateien AUS.DATA, AUS2.DATA und GAS-DATA geschrieben. Auf die Inhalte aller dieser Dateien wird weiter unten näher eingegangen.

a) Beschreibung der Eingabe

Ein Beispiel für die Eingabe INP.DATA zu einem Rechenlauf für eine Leistungstransiente gemäß einer Gauss'schen Glockenfunktion für einen Oxid-Brennstab ist im Anhang zu finden. Daraus läßt sich ersehen, daß für jede Größe, die für die Eingabe benötigt wird, eine Zeile reserviert ist. In dieser Zeile steht zuerst der Wert, dann der in TRANS.FORT verwendete FORTRAN-Name und dann noch eine knappe Erläuterung mit Angabe der verwendeten Einheiten.

Bei einigen Größen reicht diese Erläuterung völlig aus, so daß hierzu keine weiteren Ausführungen nötig sind. Für eine ganze Reihe von Größen, insbesondere für die verschiedenen Optionen, sind weitergehende Erklärungen angebracht.

Für die Größen, die Brennstoff und Hülle charakterisieren wie Innen- und Außendurchmesser, Porosität, O/Me-Verhältnis usw., sind die Fertigungswerte einzugeben und nicht die, die zum Abbrand BU gehören.

Erläuterung verschiedener Eingabegrößen

- RRAU - Brennstoff-Rißrauigkeit (cm):
minimale Rißbreite im unter Druckspannung stehenden
mechanisch festen Brennstoffring.
- IGAK - Option zur Berechnung des Spaltschließens während der
Vorbestrahlung
= 1: Spaltschließgrad wird in der Eingabe vorgegeben,
= 2: Spaltschließen wird nach Anselin /28/ berechnet,
= 3: Spaltschließen wird nach Dutt /29/ berechnet.
- FANSEC - Spaltgschließgrad bei IGAK = 1
- IREAC - Option zur Leistungsdepression in der Brennstofftablette
während der Vorbestrahlung,
= 0: Vorbestrahlung unter denselben Bedingungen wie die
Transiente,
= 1: Vorbestrahlung unter schnellem Neutronenfluß.
- IRAMP - Option für die Berechnung der Anfahrrampe für die Prä-
transiente .
- IFORM - Option für die Form der Transiente (siehe Abb. 5),
= 1: Leistungsrampe mit anschließender Leistungsreduktion
auf ein neues stationäres Niveau, nach Art der VIC-
Leistungsrampen / 1 /
= 2: Gauss'sche Glockenkurve
$$\chi = \chi_0 (1 + \exp (t - t_{\text{scram}} / 2)^2)$$

= 3: Dreiecksförmige Leistungsspitze
= 4: Scram nach stationärem Betrieb
= 5: Leistungsrampe auf neues stationäres Niveau
= 6: Leistungsrampe mit anschließendem Scram

Die zugehörigen analytischen Darstellungen dieser Funktions-
formen sind im Unterprogramm LEIKU enthalten. Hier können,
falls erforderlich, noch weitere Funktionsformen implemen-
tiert werden.

- ISKIP - Anzahl der Rechenschritte, nach denen eine Ausgabe erfolgt.

- ISCPR - Option für Kontrollausgabe auf dem Bildschirm,
= 0: keine Kontrollausgabe,
= 1: Kontrollausgabe.
- IGAS - Option für Spaltgasrechnung
= 0: keine Berechnung des transienten Spaltgasverhaltens,
= 1: Berechnung des transienten Spaltgasverhaltens.
- IAXG - Option für axiale Umsetzung von Überschußdehnungen im Brennstoff für den Fall der Leervolumenerschöpfung in der betrachteten axialen Brennstabzone,
= 0: kein Abbau der Überschußdehnung durch Brennstoffbewegung in axialer Richtung,
= 1: Abbau der Überschußdehnung erfolgt in axialer Richtung.
- IFU - Option für Brennstofftyp
= 1: Oxid-Brennstoff,
= 2: Karbid-Brennstoff.
- IFUTRA - Option für Berechnung des Brennstofftransports im Zentralkanal,
= 0: kein Brennstofftransport,
= 1: Brennstofftransport.
- IGAPCL - Option für den Heißspalt Brennstoff/Hülle vor der Transiente,
= 0: Heißspalt wird berechnet, offener Heißspalt ist möglich,
= 1: geschlossener Heißspalt wird angenommen.
- IHGAP - Option für Wahl des Wärmedurchgangsmodells,
= 1: Wärmedurchgangsmodell GAPRS,
= 2: $h_{\text{gap}} = h_{\text{gap},0} + 0,5 \cdot P_{\text{cont}}/1500$.
= 3: Wärmedurchgangsmodell nach MC Donald/Broughton /9/,
= 4: Wärmedurchgangszahl ist konstant gleich $h_{\text{gap},0}$.
- Diese Wärmedurchgangsmodelle sind im Unterprogramm WDGAP zusammengefaßt.
- IPLAST - Option für die Berechnung des Übergangs spröde/duktile im Brennstoff,
= 1: Plastizitätsmodell nach Gittus /10/,
= 2: Plastizitätsmodell nach Roberts/Wrona /11/.
Beide Modelle sind nur für Oxid-Brennstoffe gültig. Implementiert sind sie im Unterprogramm PLASTT. Modelle für karbidische Brennstoffe sind in der Literatur nicht zu finden.

- IFROZ - Option für Ausfrieren des flüssigen Brennstoffs im Zentralkanal,
= 0: kein Ausfrieren,
= 1: Ausfrieren.
- IKOSW - Option für die Berücksichtigung des transienten Brennstoffschwellens bei der mechanischen Wechselwirkung Brennstoff/Hülle,
= 0: transientes Brennstoffschwellen wird nicht berücksichtigt,
= 1: transientes Brennstoffschwellen wird berücksichtigt.

Die Größen DCHI bis DTNAE sind die für Leistungs- und Kühlmitteltemperaturverläufe benötigten Bestimmungs-Parameter. Je nach der verwendeten Zeitfunktion kann sich die Bedeutung einzelner Parameter leicht verschieben. Dazu wird der Leser auf die Abb. 5 verwiesen.

Die Größen:

CHINOW - stationäre Stableistung vor der Transiente,

GHEAT - stationäre Gammaleistung

sind jeweils die Maximalwerte (axial gesehen). Die Werte an der betrachteten Höhenkote werden vom Programm selber errechnet.

DCHI - auf CHINOW bezogene relative Leistungserhöhung.

In der jetzigen Version von TRANSIENT ist folgende Leistungsverteilung angenommen:

$$\chi = \chi_{\max} \cdot \left[1/\text{AXFAK} + (1.-1./\text{AXFAK}) \cdot \sin\left(\frac{\Pi}{\text{SLF}} \cdot (z+\text{AXVER})\right) \right]$$

Daraus folgt:

$$f_{\text{ax}} = \frac{\chi_{\text{av}}}{\chi_{\max}} = 1./\text{AXFAK} + (1.-1./\text{AXFAK}) \cdot 2 \cdot \cos\frac{\Pi \cdot \text{AXVER}}{\text{SLF}}$$

Wenn AXVER = 0 dann gilt:

$$\frac{\chi_{\max}}{\chi_{z=0}} = \text{AXFAK}$$

Dabei ist:

SLF - Länge der Brennstoffsäule.

AXVER - Verschiebung des Leistungsmaximums aus der Mitte der Brennstoffsäule während der Transiente. AXVER ist positiv, wenn das Leistungsmaximum in der unteren Hälfte der Brennstoffsäule liegt.

- RHYDPU - min. Radius für den Transport des unteren bzw. oberen
RHYDPO - Flüssigkeitspfropfens. Damit können präfabrizierte zentrale
Bohrungen berücksichtigt werden. Sind diese nicht vorhanden,
dann dienen diese Parameter dazu, das Schließend des Zentral-
kanals numerisch abzufangen. Man gibt dann also sehr kleine
Werte vor.
- DTSM - Verschmierungsintervall um die Brennstoffschmelztemperatur
- VFRAG - Volumendehnung an den kalten Enden der Brennstoffsäule durch
Fragmentierung während der Transiente.
- UCPLM - max. plastische Hülldehnung durch Vorbestrahlung.
- AXHØE - betrachtete Höhenkote: Falls diese in Bruchteilen von SLF ein-
gegeben wird, muß dieser Wert ein negatives Vorzeichen bekom-
men. Der absolute Wert wird dann vom Programm berechnet und so
auch ausgedruckt.
- RELØØ - Spaltschließen infolge Relocation der Brennstoffbruchteile
beim Abbrand Null. Eingegeben wird dieser Wert in Bruchteilen
vom Fertigungsspalt.

Die Größen CHISTA bis VBRELØ werden für vorbestrahlte Brennstäbe benötigt.
Bei veränderlichen Bestrahlungsbedingungen in der Vorbestrahlung müssen
geeignete Mittelwerte CHISTA, TKSTA und HGAPST eingegeben werden.

b) Beschreibung der Ausgabe

Wie schon eingangs erwähnt, wird die Ausgabe in drei verschiedene Dateien
geschrieben und zwar in AUS.DATA, in AUS2.DATA und in GAS-DATA. Die für
den Benutzer wichtigste Datei ist aber AUS.DATA. Bis auf die detaillierten
Ergebnisse der Spaltgasrechnung, die in GAS-DATA abgelegt sind, sind hier
alle zur Beurteilung des Stabverhaltens notwendigen Daten enthalten. In
AUS2.DATA sind nochmals in gesonderter Form einige wichtige Daten zur Wei-
terverarbeitung auf APL abgespeichert (Erstellen von Zeichnungen). Wir
werden uns deshalb im wesentlichen nur mit dem Inhalt von AUS.DATA befassen.

Dieser Inhalt läßt sich ganz grob in drei Blöcke einteilen. Der erste Block enthält nochmals alle Eingabedaten, der zweite Block die Rechen-
ergebnisse zur Vorbestrahlung und zur Prätransiente und der dritte die
Ergebnisse der eigentlichen Transiente in den durch ISKIP angesteuer-
ten Zeitpunkten.

Es würde den Rahmen dieses Berichtes sprengen, auf jedes Detail der Aus-
gabe näher einzugehen. Zudem sind in die Ausgabe textliche Erläuterungen
eingefügt, die viel zum Verständnis beitragen. Wir wollen uns deshalb
darauf beschränken, die wichtigsten Aspekte zu beschreiben. Die Bezeich-
nungen (FORTRAN-Namen und Abkürzungen) der wichtigsten Größen der Aus-
gabedateien werden in der folgenden Tabelle erläutert. In dieser Tabelle
sind auch die wichtigsten Größen von GAS.DATA angegeben.

Tabelle: Größen von AUS.DATA und GAS.DATA

FORTRAN-Name bzw. Abkürzung	Bedeutung	Einheiten
FGPROD	in der Vorbestrahlung erzeugtes Spaltgas	Ncm ³
FGFTOT	in der Vorbestrahlung freigesetztes Spaltgas	Ncm ³
FGREL	über die Brennstoffsäule gemittelte Spaltgas- freisetzung	-
GAP0	rad. Kaltspalt Brennstoff/Hülle	µm
GAP / HØTGAP	rad. Heißspalt Brennstoff/Hülle	µm
EPSFH	Dehnung des mechanisch festen Brennstoffrings bei der Vorbestrahlung bzw. bei der Prätransi- ente	µm
EPSF	Dehnung des mechanisch festen Brennstoffrings während der Transiente	µm
EPSHH	Dehnung der Hülle bei der Vorbestrahlung bzw. bei der Prätransiente	µm
EPSH	Dehnung der Hülle während der Transiente	µm
EPSDIX	Differenzdehnung Brennstoff/Hülle	µm
EPSDIF	Differenzdehnung Brennstoff/Hülle einschl. Rißdehnung	µm

EPLA	tangentiale Fließdehnung der Hülle	%
EPSCR	verfügbare Reißdehnung im Brennstoff	µm
CHI	aktuelle Stableistung	W/cm
CHIE	aktuelle Stableistung über Kontrollrechnung aus der Wärmequelllichtverteilung, es muß gelten: CHI = CHIE	W/cm
TPLAST	Plastizitätstemperatur im Brennstoff	°C
THMZ / TMITH	Hüllmittentemperatur	°C
TMITR	mittlere Brennstofftemperatur	°C
PKØNT / PINT	Kontaktdruck Brennstoff/Hülle	N/cm ²
PMAX	max. möglicher Kontaktdruck (Fließgrenze)	N/cm ²
TK	Kühlmitteltemperatur in der Prärampe	°C
CHIPRE	Stableistung in der Prärampe	W/cm
CHIVOB	mittl. Stableistung in der Vorbestrahlung	W/cm
TCOOLV	Kühlmitteltemperatur in der Vorbestrahlung	°C
DOSZ	Dosis nach der Vorbestrahlung	dpa
BUZ	Abbrand nach der Vorbestrahlung	Sp/S.A.
EPSCSW	Dehnung durch Hüllschwellen	%
UPLAFZ	Plastische Verschiebung des el. Brennstoffrings	µm
TZSTAZ	Zentraltemperatur in der Vorbestrahlung	°C
TASTAZ	Brennstoffrandtemperatur in der Vorbestrahlung	°C
RCOLUZ	Grenzradius der Säulenkristallzone	cm
TCHZ(1)	Zentraltemperatur in der Prärampe	°C
TCHZ(N)	Brennstoffrandtemperatur in der Prärampe	°C
ENTALZ	Enthalpie im Brennstoffquerschnitt in der Prärampe	Joule/cm
TGREL	transiente Spaltgasfreisetzung im ganzen Brennstoffquerschnitt	Bruchteil des rückgehaltenen Spaltgases

GASREL	totale Spaltgasfreisetzung: Vorbestrahlung und Transiente	Bruchteil des erzeugten Spaltgases
ENER1	Energieeinschluß im Brennstoff während der Transiente	Joule/g
ENER2	gesamte Energiefreisetzung im Brennstoff	Joule/g
ENER	gesamte Energiefreisetzung im Brennstoff	Joule/cm
EWf	Enthalpiezunahme im Brennstoff während der Transiente	Joule/cm
FLUGAP	aus der Brennstofftablette abgeflossene Wärmemenge. Es muß gelten: $ENER \approx EWf + FLUGAP$	Joule/cm
FLUCK	aus dem Hüllrohr abgeflossene Wärmemenge	Joule/cm
ENERC	im Hüllrohr freigesetzte Energie	Joule/cm
EWC	Enthalpiezunahme in der Hülle. Es muß gelten: $FLUGAP + ENERC \approx FLUCK + EWC$	Joule/cm
ENT ϕ T	totale Enthalpie im Brennstoff	Joule/cm
RFA / RFAZ	Brennstoffaußenradius	mm
RPL / RPLZ	Plastizitätsradius	mm
RHEALZ	Rißausheilungsradius	mm
RS ϕ LA	Solidusradius außen	mm
RS ϕ LI	Solidusradius innen	mm
RLIQA	Liquidusradius außen	mm
RLIQI	Liquidusradius innen	mm
RZEMTK / RZ, KZ	Zentralkanalradius	mm
HGAP	Wärmedurchgangszahl	W/cm ² K
RIDEZ	Rißdehnung im Brennstoff	μ m
RIDEZO	Rißdehnung im Brennstoff in der Prärampe	cm
T(R)	Temperaturwerte an den Stützstellen in der Brennstofftablette	$^{\circ}$ C
TH(R)	Temperaturwerte an den Stützstellen im Hüllrohr	$^{\circ}$ C

TNAT	Kühlmitteltemperatur an der betreffenden Höhenkote	$^{\circ}\text{C}$
TNAT(Z)	Temperaturwerte an den Stützstellen im Kühlmittel (entlang der Brennstoffsäule)	$^{\circ}\text{C}$
FGC	in der Matrix gespeichertes Spaltgas im Korn	cm^3
FGØM	in der Matrix gespeichertes Spaltgas im Korn	cm^3
BLZ	Blasenkonzentration im Korn	cm^3
FGØZ	Blasenkonzentration in der Korngrenzenschicht	cm^2
FGBL	Blasengas in der Korngrenze	A/cm^3
FGREK	aus dem Korn an die Korngrenze freigesetztes Blasengas	A/cm^3
BLR	mittlerer Blasenradius im Korn	cm
BLØ	mittlerer Blasenradius in der Korngrenzenschicht	cm
REQØ	Gleichgewichts-Blasenradius in der Korngrenzenschicht	cm
BLNF	Flächenbelegung durch Blasen in der Korngrenzenschicht	cm^2/cm^2
SWBS	transientes Brennstoffschwellen	cm^3/cm^3
FREGZ	Fraktion der Blasen im Korn, die die Korngrenze während der Transiente erreichen (gemittelt über den Querschnitt) abzüglich des abtr. Gases	-
FRELT	Anteil des in die freien Volumina transportierten Spaltgases	-
PGINST	transienter Gasdruck im axialen Segment	N/cm^2
FGSPEI	gespeichertes Spaltgas	cm^3
BU(R)	Abbrandwerte in den Brennstoffringen	Spaltgn./S.A.
BUK(R)	kritische Abbrandwerte in den Brennstoffringen	"
FGERZ	in der Vorbestrahlung erzeugtes Spaltgas	cm^3
FGRSS	zu Ende der Vorbestrahlung rückgehaltenes Spaltgas	cm^3
FGFSS	bei der Vorbestrahlung freigesetztes Spaltgas	cm^3

AXLAEN	axiale Längung der Brennstoffsäule	cm
AXLAEF	freie axiale Längung der Brennstoffsäule	cm
FUMELT	Brennstoffmasse in der Schmelzkavität mit $H > H_{Liq}$	g
FUMAS	Brennstoffmasse in der Schmelzkavität mit $H > H_{Sol}$	g
PRES	Druck in der Brennstoffschmelze	N/cm ²
DMAUS	nach dem Stabschaden ausgestoßene Brennstoff- masse	g
WCAV	Ausstoßgeschwindigkeit des Brennstoffs	cm/sec
FRAC	Rißfläche in der Hülle	cm ²
DECREP	Flächenzuwachs durch Hüllkriechen	cm ²
RADSW	Verschiebung des elastischen Brennstoffrings durch transientes Brennstoffschwellen	µm
RSUPL	Grenzradius der Schmelzkavität	mm
RPL1	Grenzradius für thermisches Brennstoffkriechen	mm
DAMAGE	Hüllschädigung	
DEREEZ	Zuwachs durch Brennstoffkriechen	µm
SIGFL	Fließspannung in der Hüllwandmitte	N/cm ²
AXKOR	Koordinate der Mittenebene der axialen Segmente	cm

4. Ergebnisse von Anwendungsrechnungen

Im Laufe seiner Entwicklung wurde der Rechencode TRANSIENT verschiedentlich zur Auslegung und Vorausberechnung von Experimenten sowie zur Analyse von Nachbestrahlungsuntersuchungsergebnissen verwendet. Im wesentlichen betraf dies die milden Überlaststörfälle der VIC-Experimente im BR 2 /31/, deren Rampenanstiegszeiten im Sekundenbereich liegen, sowie verschiedene CABRI-Leistungspulsexperimente /32/ mit Pulshalbwertsbreiten im Millisekundenbereich. Der Code ist also schon vielfältig angewendet worden; seine Verifizierungsphase ist deshalb aber bei weitem noch nicht abgeschlossen.

Im folgenden wollen wir verschiedene Aspekte des Brennstabverhaltens anhand von Rechenergebnissen des Codes beleuchten, ohne das Ziel zu verfolgen, eine umfassende und erschöpfende Deutung der betreffenden Experimente zu geben.

4.1 Ergebnisse der thermischen Analyse

Den ersten Fragenkomplex, den wir behandeln wollen, betrifft das thermische Verhalten von Brennstoff, Hülle, Kühlmittel und Strukturmaterial.

Die Cabri-Leistungspulsexperimente sind während des eigentlichen Leistungspulses in guter Näherung adiabatisch. Aufgrund der Depression im thermischen Neutronenfluß des CABRI-Reaktors wird die Randtemperatur stärker angehoben als die Brennstoff-Zentraltemperatur. Dies wird durch Abb. 6 verdeutlicht, wo für den A11 radiale Temperaturprofile im Brennstoff auf Höhe von $Z = 0,45 \cdot L_f$ (L_f = Länge der Brennstoffsäule) zu verschiedenen Zeitpunkten während und nach dem Leistungspuls aufgetragen sind.

Durch das Brennstoffschmelzen wird das Temperaturprofil weiter abgeflacht (siehe Kurven (3) und (4)). Nach dem Leistungspuls wird durch Wärmetransport in die Hülle zuerst die Temperatur in einem äußeren Bereich des Brennstoffs abgesenkt, während die Zentraltemperatur noch längere Zeit nahezu konstant bleibt (Kurve (5)).

Um den Brennstoff zu schmelzen, muß die Schmelzenthalpie aufgebracht werden. Dies hat zur Folge, daß durch den Phasenwechsel der Temperaturanstieg gebremst wird. Dies ist in Abb. 7 veranschaulicht, wo für den A1R der Anstieg der Zentraltemperatur auf Höhe $Z = 44$ cm dargestellt ist.

Der Brennstab war beim A1R-Experiment mit UO_2 -Tabletten gefüllt. Die Schmelztemperatur liegt also bei $2840^\circ C$. Für die Rechnung wurde ein Verschmierungs-Intervall von $40^\circ C$ angenommen; d.h. die Schmelzenthalpie wird zwischen 2820 und $2860^\circ C$ aufgebracht. Die Grenzen des Verschmierungsintervalls sind als T_{Sol1} und T_{Liq1} bezeichnet. Mit Erreichen von $2820^\circ C$ wird der Anstieg der Zentraltemperatur schlagartig stark reduziert.

Da beim A1R keine Messung der Brennstofftemperaturen durchgeführt wurde, kann man die gerechneten Brennstofftemperaturen nur indirekt über die Ausdehnung der Schmelzzone verifizieren. Dazu ist in Abb. 8 der zeitliche

Verlauf des Schmelzradius bei $Z = 44$ cm aufgetragen. Durch die finite Rechenstruktur liegen die Rechenpunkte nicht auf der glatt durchgezogenen Kurve. Der größte gerechnete Wert des Schmelzradius liegt bei 2 mm, während bei der Nachuntersuchung eine maximale Ausdehnung der Schmelzzone von 2,3 mm (auf Höhe des Leistungsmaximums, $Z = 38$ cm) ermittelt wurde. Da im Bereich des Leistungsmaximums die axiale Variation sehr gering ist, ist der gemessene Wert auch für $Z = 44$ cm repräsentativ.

Die Rechnung liegt also um ca. 15 % niedriger als die Messung, was in der Fläche einer Differenz von 35 % entspricht.

Auch beim A11 wurde festgestellt, daß die Rechenwerte von TRANSIENT unter den experimentellen Werten liegen /33/ und zwar ist der Effekt in derselben Größenordnung.

Diese Diskrepanz kann verschiedene Ursachen haben:

- a) Die Brennstofftemperaturen bei $t = 0$ sind zu niedrig.
- b) Der Temperaturanstieg während der Transiente ist zu gering.

Was die Brennstofftemperaturen bei $t = 0$ anbetrifft, so wird man zuerst auf den Wärmedurchgang tippen, da die Wärmeleitfähigkeit des Cabri- UO_2 -Brennstoffs direkt gemessen wurde. Die bisher diskutierten Ergebnisse für den A1R wurden nun unter der Annahme eines Anteils von 10 % für das Ar-Äquivalent am Füllgas gewonnen. Erhöht man diesen Wert auf 30 %, dann erhöhen sich die Brennstofftemperaturen bei $t = 0$ um 50 - 100 °C, was einer Enthalpiezunahme von mehr als 100 J/cm im Brennstoffquerschnitt entspricht. Damit erhält man dann einen maximalen Schmelzradius von 2,4 mm. Die Unsicherheit im Wärmedurchgang durch den Spalt Brennstoff/Hülle bei $t = 0$ reicht also aus, um die Diskrepanz im Schmelzradius abzudecken.

Im Zusammenhang mit dem Punkt b) ist die Frage nach der Genauigkeit des benutzten Verfahrens interessant. Ein gewisses Maß für die Rechengenauigkeit ist die Diskrepanz zwischen der eingeschossenen Energie auf der einen Seite und der Summe der Enthalpiezunahme im Brennstoff und der an die Hülle abgeflossenen Energie auf der anderen Seite.

Diese Größe ist für den A1R in Abb. 9 gegen die Zeit aufgetragen. Die großen negativen Werte bei kurzen Zeiten sind eine Folge von kleinen Unstimmigkeiten zwischen dem stationären und instationären Programmteil, die ca. 1 bis 2 % von der Brennstoffenthalpie bei $t = 0$ ausmachen.

Im entscheidenden Bereich liegen die Werte ziemlich konstant bei 5 %. Diese fehlenden 5 % in der Brennstoffenthalpie-Zunahme können nun auch ihrerseits die Diskrepanz im Schmelzradius zu einem beträchtlichen Teil erklären.

Bei den Cabri-Leistungspulsexperimenten, in denen der Stabschaden schon kurz nach dem Pulsmaximum erfolgt, hat sich bis dahin die Kühlmitteltemperatur noch kaum erhöht. Dies wird aus Abb. 10 deutlich, wo für Cabri A3 der zeitliche Verlauf verschiedener charakteristischer Temperaturen im Brennstoff-(Zentral(T_{fi})- und Randtemperatur(T_{fa})), in der Hülle (Innen(T_{Hi})- und Mittentemperatur (T_{Hm})) sowie die mittlere Kühlmitteltemperatur T_{cool} und zwar auf Höhe von $Z = 44$ cm BFC (BFC: Abstand vom unteren Ende der Brennstoffsäule) aufgetragen sind. Der Stabschaden erfolgte 58 ms nach Auslösung des Leistungspulses.

Dieses Ergebnis besagt, daß man das Modell für die transiente Temperaturberechnung des Kühlmittels sowie die Modelle für den Wärmedurchgang im Spalt und die Wärmeübertragung aus Niob-Rohr nur an solchen Experimenten überprüfen kann, bei denen der Brennstab intakt geblieben ist bzw. bei denen der Stabschaden sehr spät erfolgt ist. Da sich nun die bisherigen Rechenaktivitäten mit TRANSIENT auf die Deutung der Stabschäden konzentrieren, bietet sich der AI2 an, wo der Stabschaden nach 230 ms eintrat.

Die Ergebnisse für dieses Experiment sind in Abb. 11 zu sehen. Die Temperatur $T_f(n-1)$ ist dabei die Brennstofftemperatur am zweitäußersten Stützring. Da mit 26 Stützringen gerechnet wurde, ist es also die Temperatur am 25. Stützring.

In Abb. 12 sind noch zum Vergleich die Ergebnisse aufgetragen, die man erhält, wenn keine Wärme an das Niob-Rohr übertragen wird. Durch die Wärmeübertragung an das Niob-Rohr wird also der Temperaturanstieg im Kühlmittel und im Hüllrohr beträchtlich gedämpft.

In Abb. 13 ist nun für den AI2 zum Zeitpunkt des Hüllschadens ($t = 230$ ms) das gerechnete Kühlmitteltemperaturprofil mit Anzeigen der Thermolemente verglichen. Auf den ersten Blick würde man die Übereinstimmung als gut bezeichnen. Beim Vergleich ist allerdings noch nicht berücksichtigt, daß die Thermolemente eine gewisse Antwortzeit haben, die für die freistehenden zu ca. 40 ms bestimmt wurde. Die tatsächlichen Temperaturen im

Kühlkanal liegen also höher, d.h. aber die von TRANSIENT berechneten Kühlmitteltemperaturen sind etwas zu niedrig.

Ob die Diskrepanz auf einem zu niedrigen Wärmedurchgang im Spalt Brennstoff/Hülle oder an einer zu starken Wärmeübertragung aus Niob-Rohr beruht, können nur die Analysen weiterer Experimente ohne Stabschäden wie A1R oder A2 sowie eine Verbesserung der Modellierung des thermischen Verhaltens des Niob-Rohres zeigen.

4.2 Ergebnisse der mechanischen Analyse

Neben der thermischen Analyse, die die Basis für alle weiteren Modellierungen darstellt, bildet die mechanische Analyse einen zusätzlichen Schwerpunkt von TRANSIENT. Dabei hat man anhand von gemessenen Hülldehnungsprofilen eine weitere Möglichkeit, die Modellierung zu verifizieren.

Ein gutes Beispiel ist hier das Experiment Cabri AI1. In Abb. 14 sind in das gemessene Hülldehnungsprofil Rechenwerte von TRANSIENT eingetragen. Wenn man von lokalen Schwankungen absieht, die man mit einem Brennstabcode sowieso schwer nachvollziehen kann, dann ist bis auf den Bereich zwischen 900 und 1000 mm die Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung recht gut.

Die Hüllverformung bei Cabri AI1 ist durch die Überschußdehnung des kalten Brennstoffrings verursacht. Das Ergebnis für den AI1 zeigt nun fürs erste, daß das in TRANSIENT verwendete Drei-Zonenmodell zusammen mit der empirischen Relation von Roberts und Wrona brauchbare Ergebnisse liefert.

Zur Ergänzung sind in Abb. 15 für Cabri AI2 die Hülldehnungsprofile zu verschiedenen Zeitpunkten des Leistungspulses aufgetragen. Die geringe Hülldehnung bei $t = 0$ rührt von der Prätransiente her. Die Hülldehnung während der eigentlichen Transiente beginnt dann mit der steilen Leistungsanstiegsphase. Sie ist im Bereich des Leistungsmaximums zuerst gesättigt.

Im einfachen Drei-Zonenmodell können die Wärmespannungen im Hüllrohr nicht explizit berücksichtigt werden. Um die Effekte durch Wärmespannungen verifizieren zu können, wurde ein kleiner Rechencode CSTRES

entwickelt, in dem den Spannungs-Dehnungsgleichungen in der Hülle nach der Transfermatrizen-Methode /8/ gelöst werden. Vorgegeben werden die Hülltemperaturen und der Innendruck oder die Verschiebung am Hüllinnenrand.

Eine Analyse des Cabri AI3-Experiments ergab nun, daß die tangentialen Hüllverformungen durch Wärmespannungen am Außenrand der Hülle bei ca. 0,2 % liegen (siehe Abb. 16). Für Cabri AI1 kann man also einen Wert deutlich unter 0,1 % abschätzen, d.h. es ergibt sich in Abb. 14 keine gravierende Verschiebung.

Interessant ist noch ein Vergleich des Drei-Zonenmodells mit der Transfermatrizen-Methode. Dazu dient Abb. 17. Es sind hier eingetragen die Tangential- und Radialspannungen über der Wandstärke nach der Transfermatrizen-Methode, wenn man die Verschiebung an der Hüllinnenseite vorgibt ($u = 6 \mu\text{m}$ und $u = 33 \mu\text{m}$). Weiterhin sind dargestellt die Kontaktdrücke und die Tangentialspannungen nach dem Drei-Zonenmodell. Unter Berücksichtigung von:

$$p_i = -\sigma_r(r_{Hi})$$

kann man also feststellen, daß die Kontaktdrücke des Drei-Zonenmodells um 20 bis 30 % höher liegen als die nach der Transfermatrizen-Methode. Dasselbe gilt in etwa für die mittleren Tangentialspannungen im Hüllrohr.

Die entscheidende Ursache für das Stabversagen bei den bisherigen Cabri-Leistungspulsexperimenten war die Erschöpfung des Leervolumens durch Schmelz- und thermische Dehnung des Brennstoffs. Damit es zu einem massiven Druckaufbau in der Brennstoffschmelze kommen kann, muß gewährleistet sein, daß der obere Teil der Brennstoffsäule wie ein Pfropfen wirkt, der die Brennstoffschmelze an der axialen Ausdehnung hindert. Diese Bedingung wird durch eine genügende mechanische Wechselwirkung zwischen Brennstoff und Hüllrohr im entsprechenden axialen Bereich erfüllt. Die mechanische Wechselwirkung rührt von der oben diskutierten Überschußdehnung des kalten Brennstoffrings her.

Wie z.B. die Abb. 18 zeigt, nimmt - mit Ausnahme von AI2 - bei den Cabri-Leistungspulsexperimenten die Brennstoffenthalpie im Bereich des Schadenzeitpunktes steil zu. Dies hat zur Folge, daß i.a. zwischen Leervolumenerschöpfung und Eintritt des Stabschadens nur eine sehr kurze Zeitspanne

liegt. Dies ist in Abb. 19 demonstriert, wo für Cabri AI3 der zeitliche Verlauf der drei charakterisierenden Größen aufgetragen ist, nämlich der des Kontaktdruckes durch mechanische Wechselwirkung im oberen Teil der Brennstoffsäule, der des Druckes in der Schmelzzone und der der plastischen Hüllverformung an der Schadensstelle. Man sieht, daß in der entscheidenden Phase die Haftbedingung Brennstoff/Hülle gewährleistet ist.

Nach Erschöpfung des Leervolumens bei knapp 79 ms baut sich sehr schnell (ca. 1 ms) ein hoher Druck in der Brennstoffschmelze auf, bis die Fließgrenze in der Hülle überschritten wird. Die Duktilitätsgrenze im Hüllrohr (ca. 1,5 %) wird dann sehr schnell erreicht. Aus den Durchflussmesseranzeigen vor dem Stabschaden von verschiedenen Cabri-Experimenten (z.B. A3, A4) hat man Hinweise, daß diese Interpretation realistisch ist.

Schon vor der Erschöpfung des Leervolumens hat man einen gewissen Druckaufbau in der Brennstoffschmelze, der mitverantwortlich ist, daß die Brennstoffschmelze Leerräume in Anspruch nimmt. Diese Phase ist aber für das Stabversagen nicht entscheidend, sie wird bis jetzt in TRANSIENT auch nicht modelliert.

Die Hülldehnung in TRANSIENT wird nach einem ideal elastisch-plastischen Verformungsgesetz bestimmt. Damit wird in MPRES nur im Bereich minimaler Hüllfestigkeit plastische Hüllverformung aufkummuliert. Die spätere Berücksichtigung von Dehnungsverfestigung wird dann die Berechnung von Dehnungsprofilen erlauben.

Die Druckwerte in Abb. 19 basieren auf quasistationären Relationen für die Festigkeit des AISI 316. Die Berücksichtigung neuerer Meßergebnisse für das transiente Verhalten wird zwar die Werte etwas verändern, nicht aber die Interpretation des Phänomens.

4.3 Ergebnisse zum Spaltgasverhalten

Spaltgasschwellen und Spaltgasfreisetzung sind wichtige Aspekte des Brennstabverhaltens unter transienten Bedingungen. Für die Cabri-Leistungspulsexperimente mit Stabschäden war nun insbesondere die Aufteilung in inter- und intragranulare Gasblasen von Interesse.

Durch den Oberflächenspannungseffekt sind Gasblasen mit Radien kleiner $5 \cdot 10^{-5} - 10^{-6}$ cm praktisch nicht unmittelbar am Druckaufbau in der Brennstoffschmelze beteiligt, d.h. die intragranularen Blasen tragen so gut wie nichts bei.

Die korrekte Berechnung des transienten Spaltgasverhaltens setzt nun voraus, daß man den Zustand bei $t = 0$ genau kennt, d.h. das stationäre Modell muß korrekt sein. In Abb. 20 ist nun die nach dem Többe-Gehr-Modell gerechnete Spaltgasfreisetzung über der Brennstoffsäule aufgetragen. Weiterhin eingetragen sind die Meßwerte eines Vergleichsbrennstabes.

Die Meßwerte liegen alle im selben Bereich, während das Rechenergebnis die starke Temperatur- und Abbrandabhängigkeit widerspiegelt, die im Modell enthalten sind.

Das Modell geht davon aus, daß Blasenwanderung der entscheidende Freisetzungsmechanismus ist, angepaßt wurde es in erster Linie an Meßergebnissen von Brennstoffproben mit mittlerem bis hohem Abbrand.

Die in Abb. 20 dargestellten Meßergebnisse deuten auf einen athermischen Freisetzungsmechanismus hin.

Ein wichtiger Punkt für die Cabri-Leistungspulsexperimente ist die Blasenwanderung aus dem Korn an die Korngrenzen, da dieser Effekt den Beitrag des Spaltgases zum Druckaufbau bestimmt.

In Abb. 21 ist für Cabri AI3 die Freisetzung an die Korngrenzen zu zwei Zeitpunkten während der Transiente aufgetragen. Variiert wurde noch die Korngröße (7 bzw. 10 μm). Es wurde dabei angenommen, daß die Kornstruktur auch in der Brennstoffschmelze noch einige Zeit (ca. 20 ms) erhalten bleibt. Bei 72 ms ist die Freisetzung noch sehr klein, bei 83 ms liegt sie im Mittel schon bei 15 %.

Bei $t = 0$ befinden sich ca. 20 % des rückgehaltenen Spaltgases an den Korngrenzen, größtenteils in Blasen, d.h. beim AI3 dürften ca. 35 bis 40 % des im entsprechenden Bereich rückgehaltenen Spaltgases am Druckaufbau in der Schmelze teilgenommen haben.

Gas in großen Blasen ($\geq 10^{-5} - 10^{-4}$ cm) hat einen um etwa eine Größenordnung höheren Volumenbedarf als Gas in kleinen Blasen ($10^{-6} - 10^{-7}$ cm).

Die Koaleszenz von kleinen und großen Spaltgasblasen führt damit zu einem Volumenmehrbedarf und folglich zu einer Druckerhöhung in der Brennstoffschmelze. Dieser Effekt hat wahrscheinlich zum späten Stabschaden von

Cabri AI2 geführt. Die Verminderung der Hüllfestigkeit durch Temperaturerhöhung nach dem Leistungspuls kann nach den neueren Messungen nicht entscheidend gewesen sein.

Die Modellierung des Spaltgasverhaltens in der Brennstoffschmelze über Zeiträume von mehr als 100 ms ist allerdings in TRANSIENT noch nicht implementiert, so daß dazu noch keine Rechenergebnisse vorgestellt werden können.

Danksagung

An dieser Stelle sei vermerkt, daß Dr. Müller-Lyda über eine längere Zeit an der Entwicklung des Codes beteiligt war und zwar insbesondere mit wertvollen Beiträgen zur Beschreibung der Materialeigenschaften und zur Organisation des Rechencodes. Des weiteren hat er das Drei-Zonenmodell beigesteuert.

Weiterhin ist der Autor Frau B. Hauth für das Schreiben des Berichtes und Herrn F. Bauer für das Erstellen der Zeichnungen verpflichtet.

Literatur:

- /1/ H. Steiner, I. Müller-Lyda;
unveröffentlichter Bericht, 1979
- /2/ T.J. Bjørlo:
A thermal model for numerical calculations of temperature transients
in cylindrical fuel rods,
HPR 190, 1975
- /3/ I. Müller-Lyda:
Untersuchungen zur mechanischen Wechselwirkung zwischen Brennstoff und
Hüllrohr in Brennstäben von Schnellen Brüter-Reaktoren,
KfK-Bericht 3012, 1980
- /4/ L. Väth:
Current Status of Modeling Fission Gas Behaviour in the Karlsruhe Code
LANGZEIT/KURZZEIT,
KfK-Bericht 2962, 1980
- /5/ C. Bonacina, et al.:
Numerical Solutions of Phase-Change Problems,
Int.Journ.of Heat and Mass Transfer, Vol. 16, pp.1825-1832, 1973
- /6/ R. Godesar:
Untersuchung des Einflusses der Wärmedurchgangskoeffizienten im Spalt
zwischen Brennstoff und Hülle auf die sicherheitstechnische Auslegung
von stabförmigen Brennstäben für Schnelle Brutreaktoren,
Dissertation TH-Aachen, 1973
- /7/ H. Kämpf, H. Elbel, F. Depisch:
Das Rechenprogramm SATURN-1a für Brennstäbe,
KfK-Bericht 1575, 1972
- /8/ L.J. Siefken:
FRAP-T4 - A Computer Code for the Transient Analysis of Oxide Fuel
Pins, CDAP-TR-78-027, 1978
- /9/ P.E. Mac Donald et al.:
MATPRO-Version 9, A Handbook of Material Properties for Use in the
Analysis of Light Water Reactor Fuel Rod Behaviour,
TREE-NUREG 1005, 1976
- /10/ J. H. Gittus:
Theoretical Magnitude of the Stresses Produced in the Fuel Cladding by
the Expansion of Cracked Pellets: Effect of Interfacial Dislocations
(Interfaceons) and Pellet Relaxation,
Nucl. Eng. and Design 32, p. 358, 1975
- /11/ J.T. Roberts and B. J. Wrona:
Nature of Brittle-to-Ductile Transition in UO_2 -20 wt-% PuO_2 Nuclear
Fuel,
Journ. Nucl. Mat. 41, pp 23-28, 1971

- /12/ J.R. Matthews:
Mechanical Properties and Diffusion Data for Carbide and Oxide Fuels,
AERE-M-2643, 1974
- /13/ A. Padel, Ch. de Novion:
Constantes elastiques des carbures, nitrures et oxides d'uranium et
de plutonium,
Journ. Nucl. Mat. 33, 1969
- /14/ H. Zimmermann:
unveröffentlicher Bericht, 1982
- /15/ H.L. Gehr, F. Többe:
persönliche Mitteilung, 1980
- /16/ H. Zimmermann:
Investigations on Swelling and Fission Gas Behaviour in Uranium Dioxide,
Journ. Nucl. Mat. 75, 1978, pp. 154-161
- /17/ H. Steiner:
PSTAT: Ein Rechencode für die mechanische Wechselwirkung Brennstoff/Hülle
in Schnellbrüter-Brennstäben,
KfK-Bericht 3319, 1982
- /18/ E.E. Gruber:
A Generalized Parametric Model for Transient Gas Release and Swelling in
Oxide Fuels,
Nucl. Techn. 35, 1977, pp. 617-634
- /19/ D.H. Worledge:
Fuel Fragmentation by Fission Gases During Rapid Heating,
NUREG/CR-1611, 1980
- /20/ C.A. Hinman and E.H. Randklev:
Transient Redistribution of Intragranular Fission Gas in Irradiated
Mixed Oxide, Conf. on Reactor Safety Aspects of Fuel Behaviour,
Sun Valley, 1981, Vol. II, p. 247
- /21/ G.W. Greenwood et al.:
The Role of Vacancies and Dislocations in the Nucleation and Growth
of Gas Bubbles in Irradiated Fissile Material,
Journ. Nucl. Mat. 4, 1959, p. 305
- /22/ G. Kalimullah:
FRESS Pin Failure Model and its Application to E-8 TREAT Test,
LA-7938-C, 1979, pp. 99-115
- /23/ P.C. Carman:
Flow of Gases Through Porous Media,
Academic Press Inc., Publishers, London, 1956

- /24/ J.C. Melis and A. Meyer-Heine:
PINEX II: French Contribution to an International Benchmark Experiment,
LA-7938-C, 1979, p.52
- /25/ L.L. Smith, et al.:
SAS/FCI, A Fuel-Coolant Interaction Model for LMFBR Whole-Core
Accident Analysis,
Ann Arbor, 1973
- /26/ P. Coddington:
PINEX-AR, A Fuel Dynamics Code Applied to PINEX-2 Prediction and
Reactor Analysis,
LA-7938-C, 1979, p.67
- /27/ V.L. Smith:
SAS/FCI: The SAS3A Fuel-Coolant Interaction Model,
ANL/RAS 75-33, 1975
- /28/ F. Anselin:
unveröffentlichter Bericht, 1971
- /29/ D.S. Dutt, et al.:
Modeling of the Fuel Cladding Postirradiation Gap in Mixed-Oxide
Fuel Pins,
Trans. Am. Nucl. Soc. 17, 1975, p. 175
- /30/ I. Müller-Lyda, H. Steiner:
unveröffentlichter Bericht, 1982
- /31/ H. Plitz, D. Freund:
Bestrahlungsexperimente zum Betriebstransientenverhalten,
KfK-Nachrichten, Jg. 15, 2/83, 1983
- /32/ J. Dadillon, et al.:
CABRI-Project-Recent Progress and Present Status,
Proc. of the Lyon Conference 1983, Vol. II, 1983, p.177
- /33/ H. Kleykamp, R. Fritzen:
unveröffentlichter Bericht, 1982
- /34/ A.W. Cronenburg et al.:
A Single-Bubble Model for Sodium Expulsion from a Heated Channel,
Nucl. Eng. Des. 16, 1971, p.285

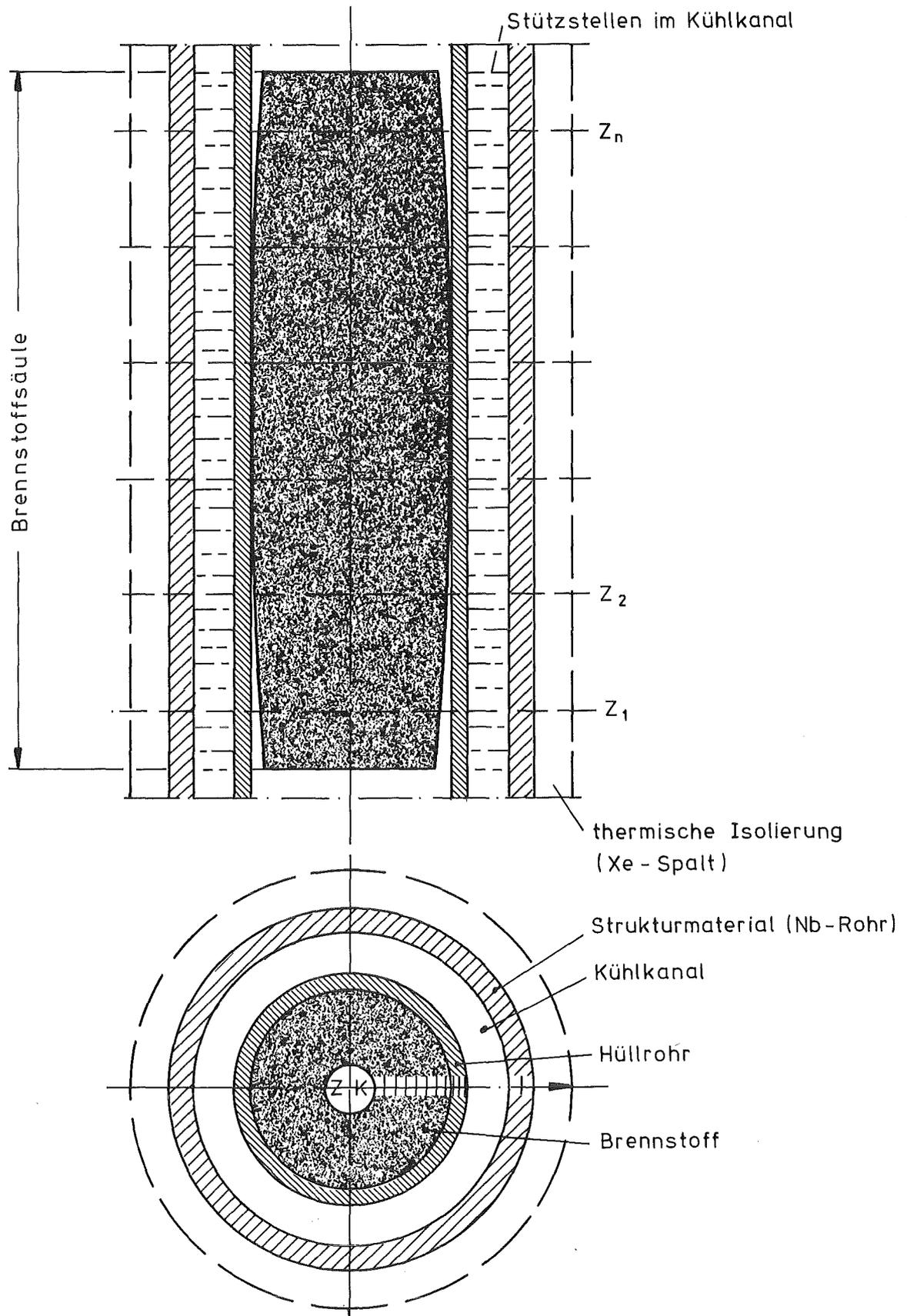


Abb. 1 Schematische Darstellung der Rechengeometrie

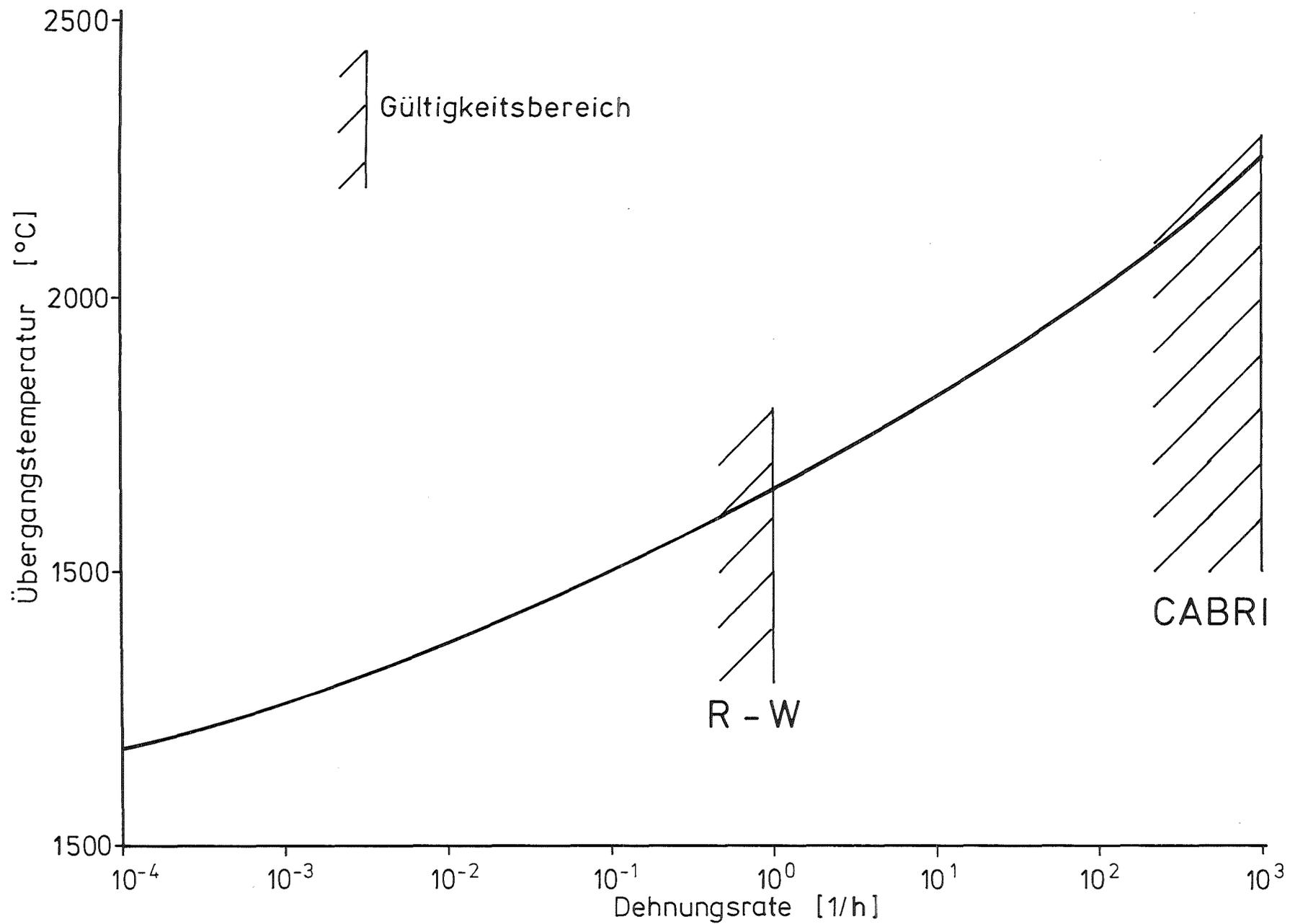


Abb.2 Übergangstemperatur von sprödem zu duktilem Verhalten nach der Roberts-Wrona-Beziehung

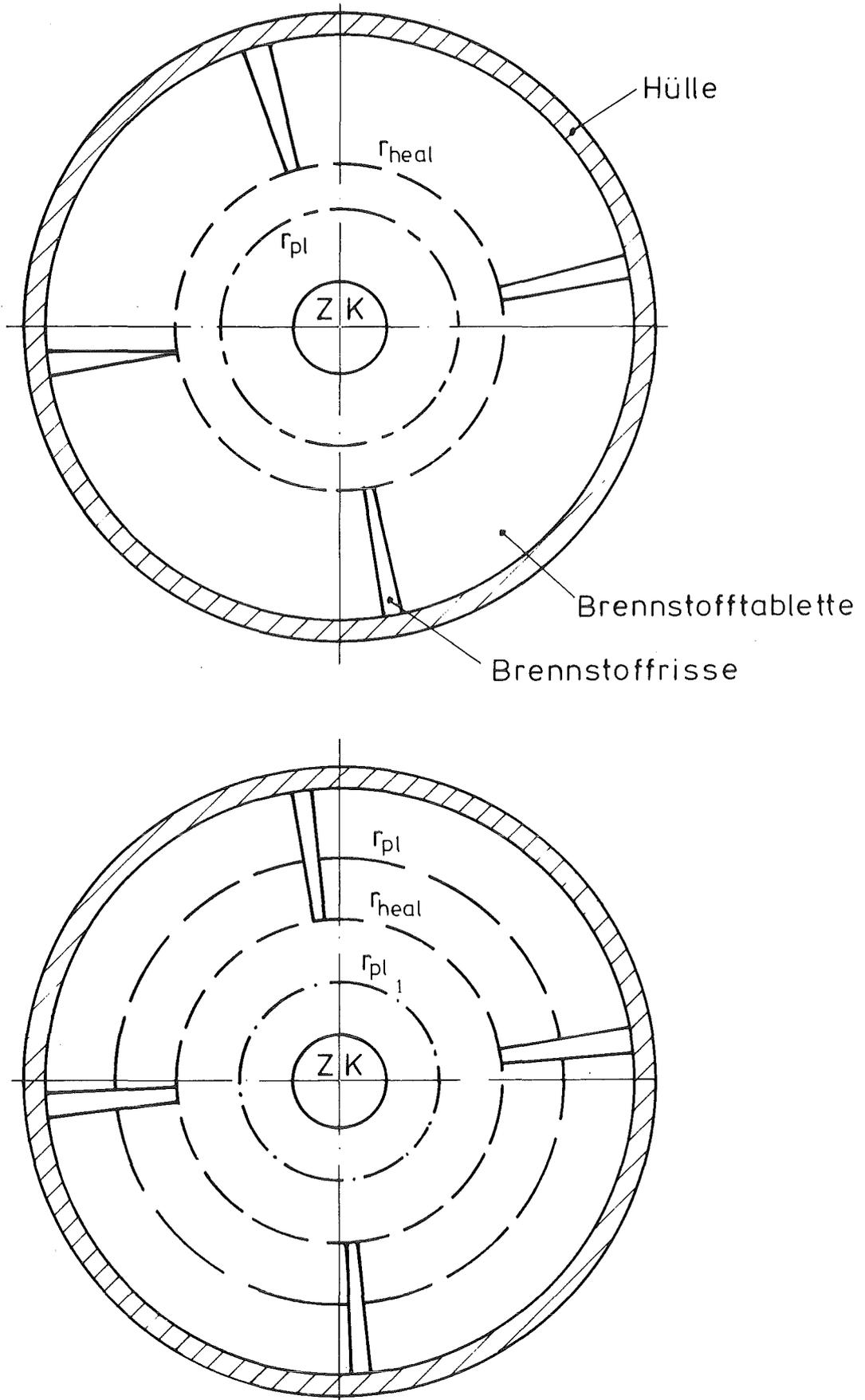


Abb. 3 Schematische Darstellung zum Rissmodell

Flussdiagramm von TRANSIENT

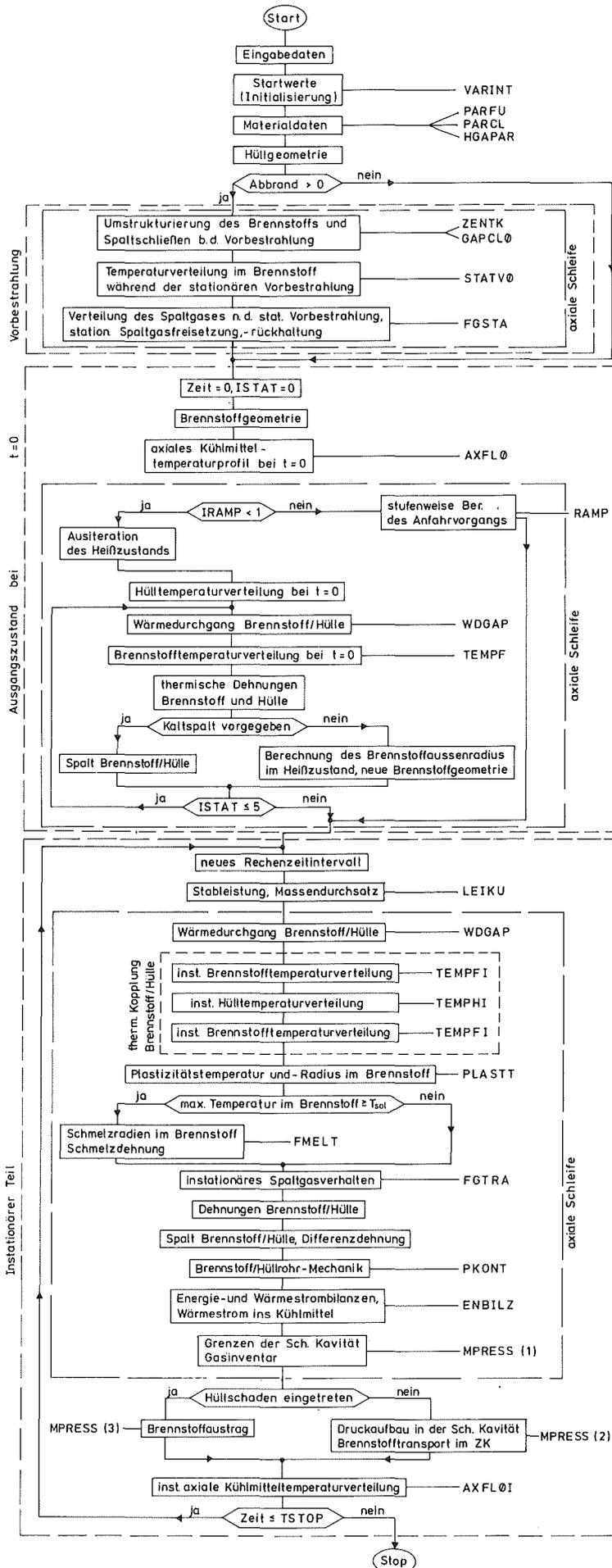


Abb. 4

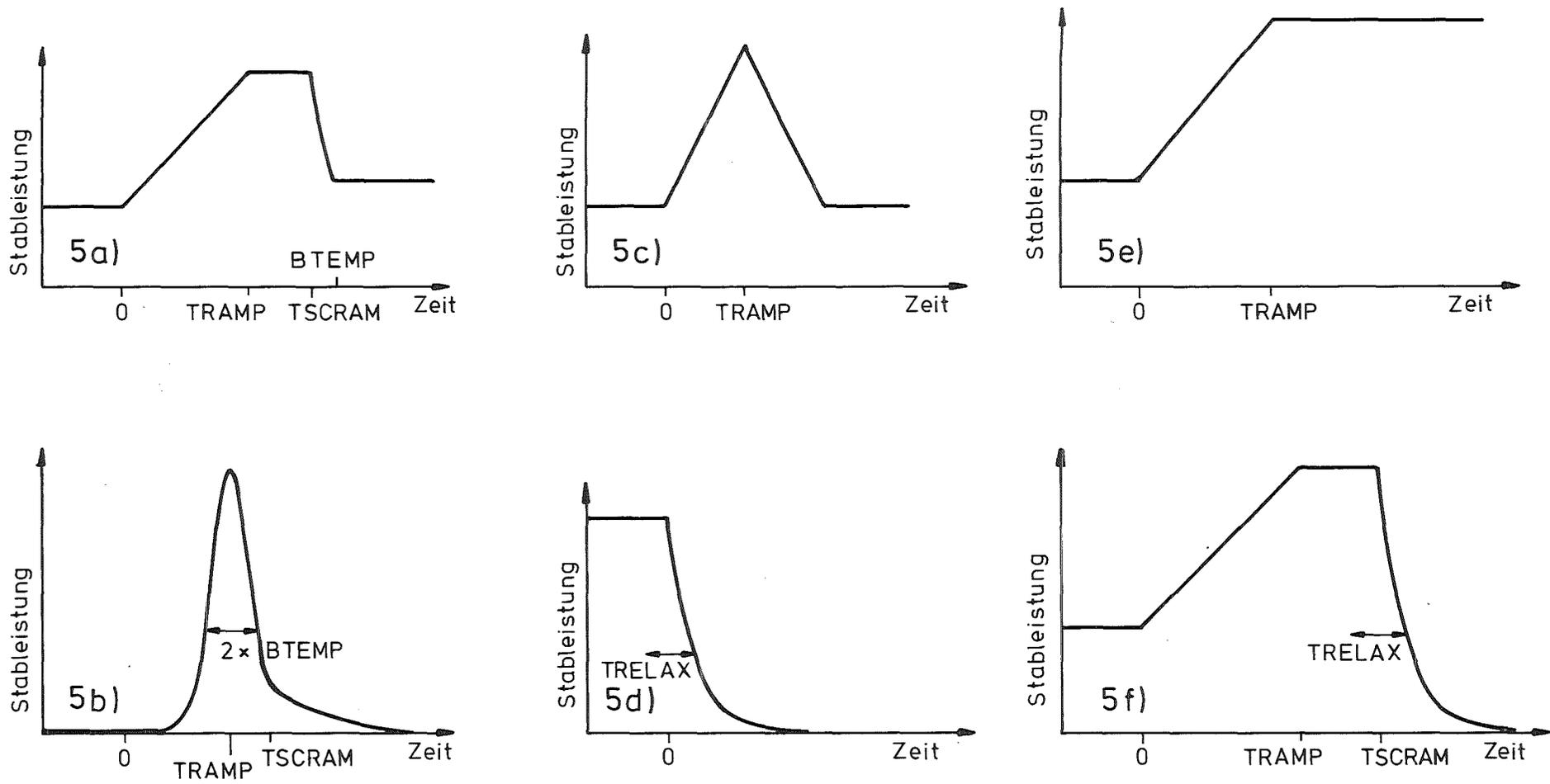


Abb. 5 Schematische Darstellungen der durch IFORM ansprechbaren Leistungsverläufe

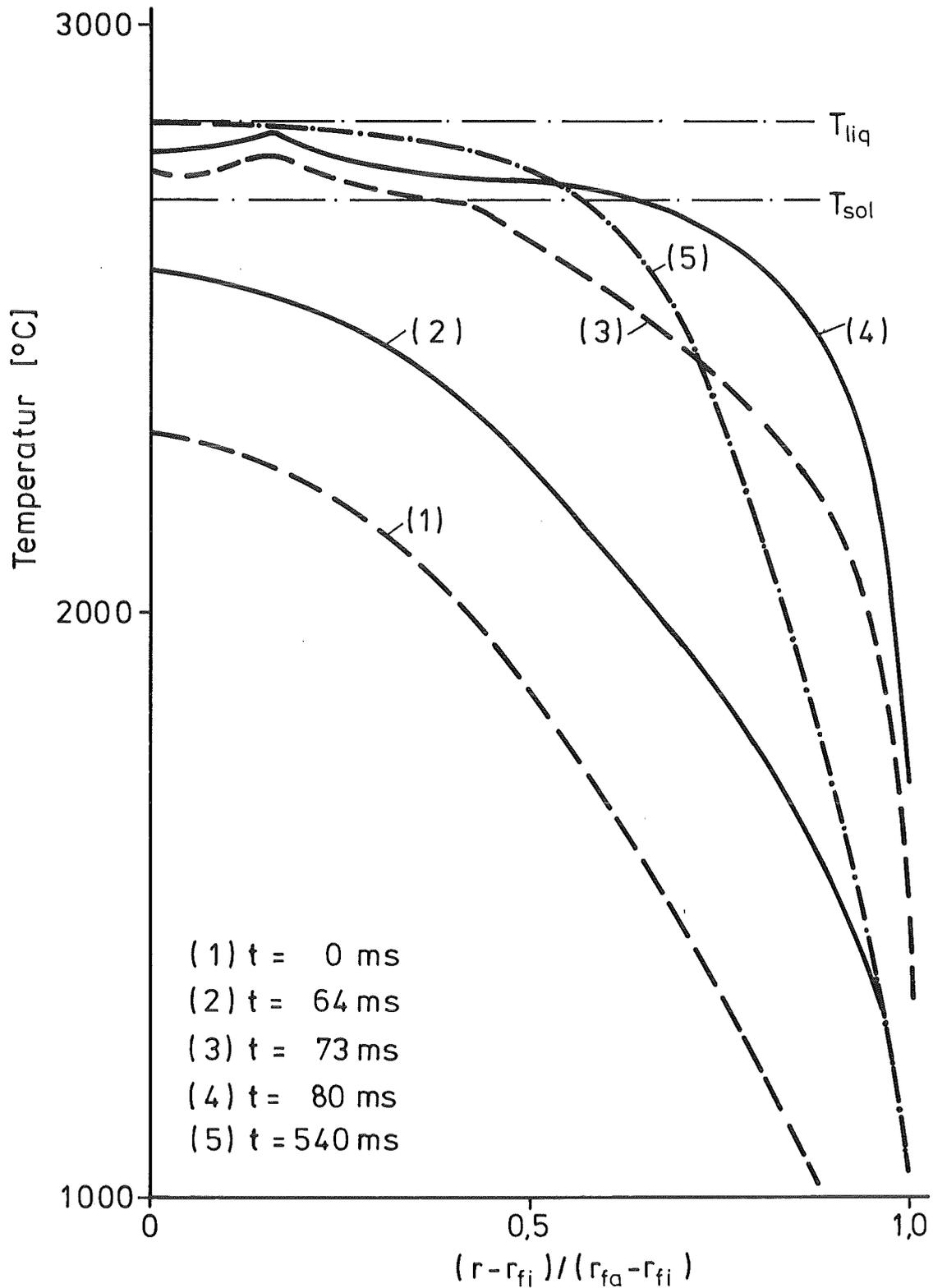


Abb. 6 Radiale Temperaturverteilung im Brennstoff bei $\xi = 0,45 L_f$ zu verschiedenen Zeitpunkten während des TOP für CABRI AI 1

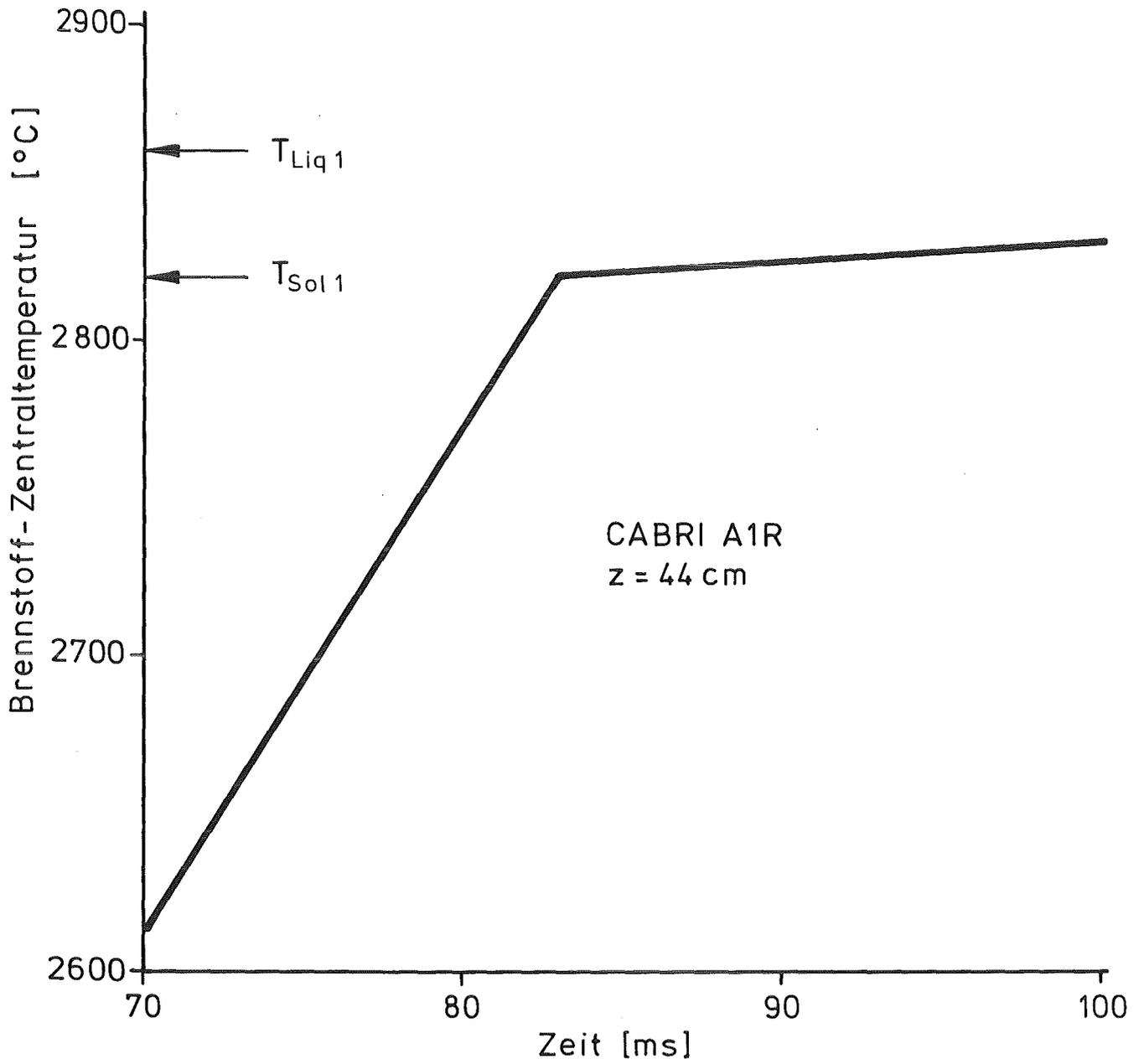


Abb. 7 Anstieg der Brennstoffzentraltemperatur beim A1R vor und nach Schmelzbeginn

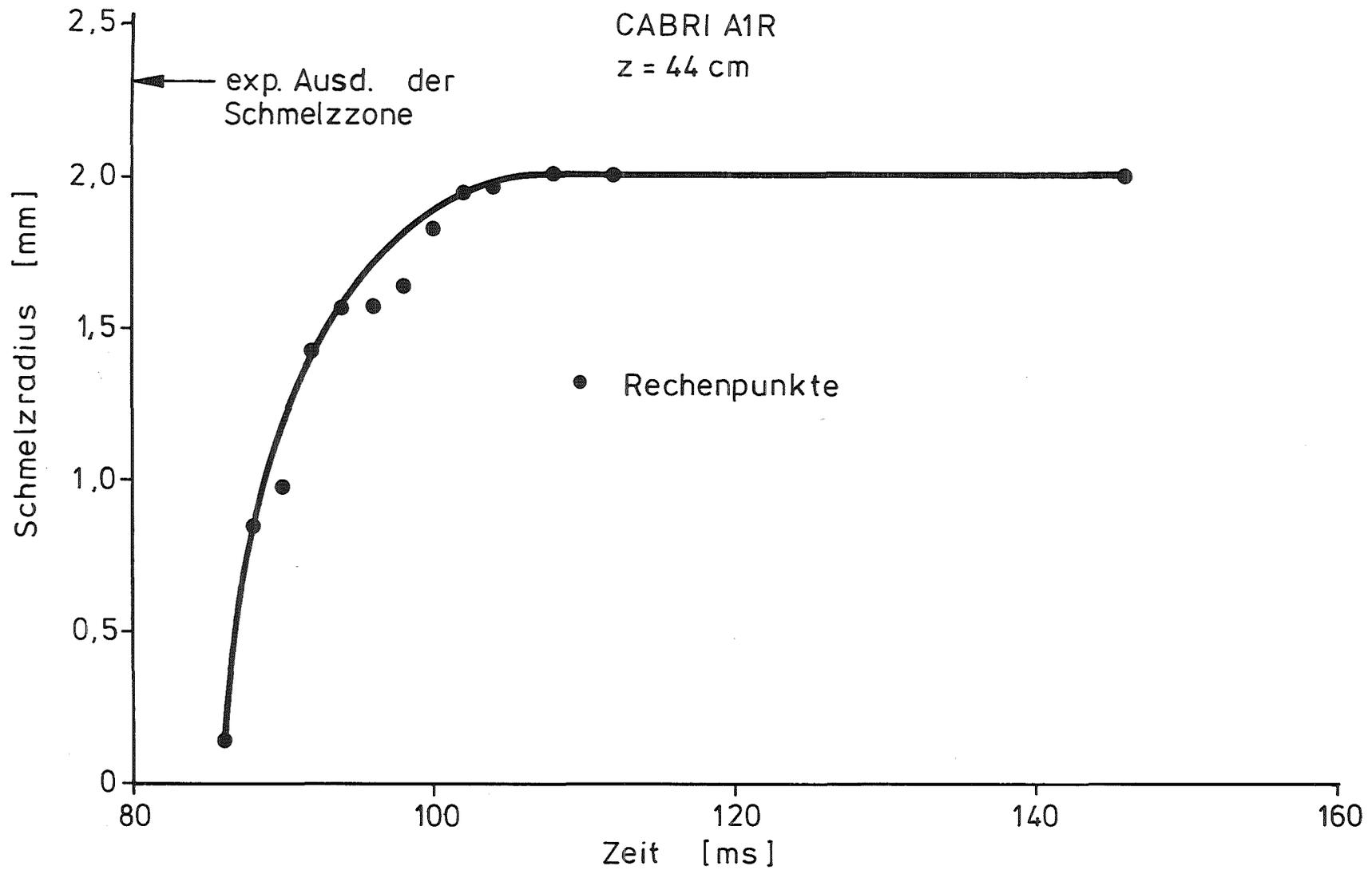


Abb. 8 Zeitlicher Verlauf des Schmelzradius bei A1R auf Höhe von z = 44 cm BFC

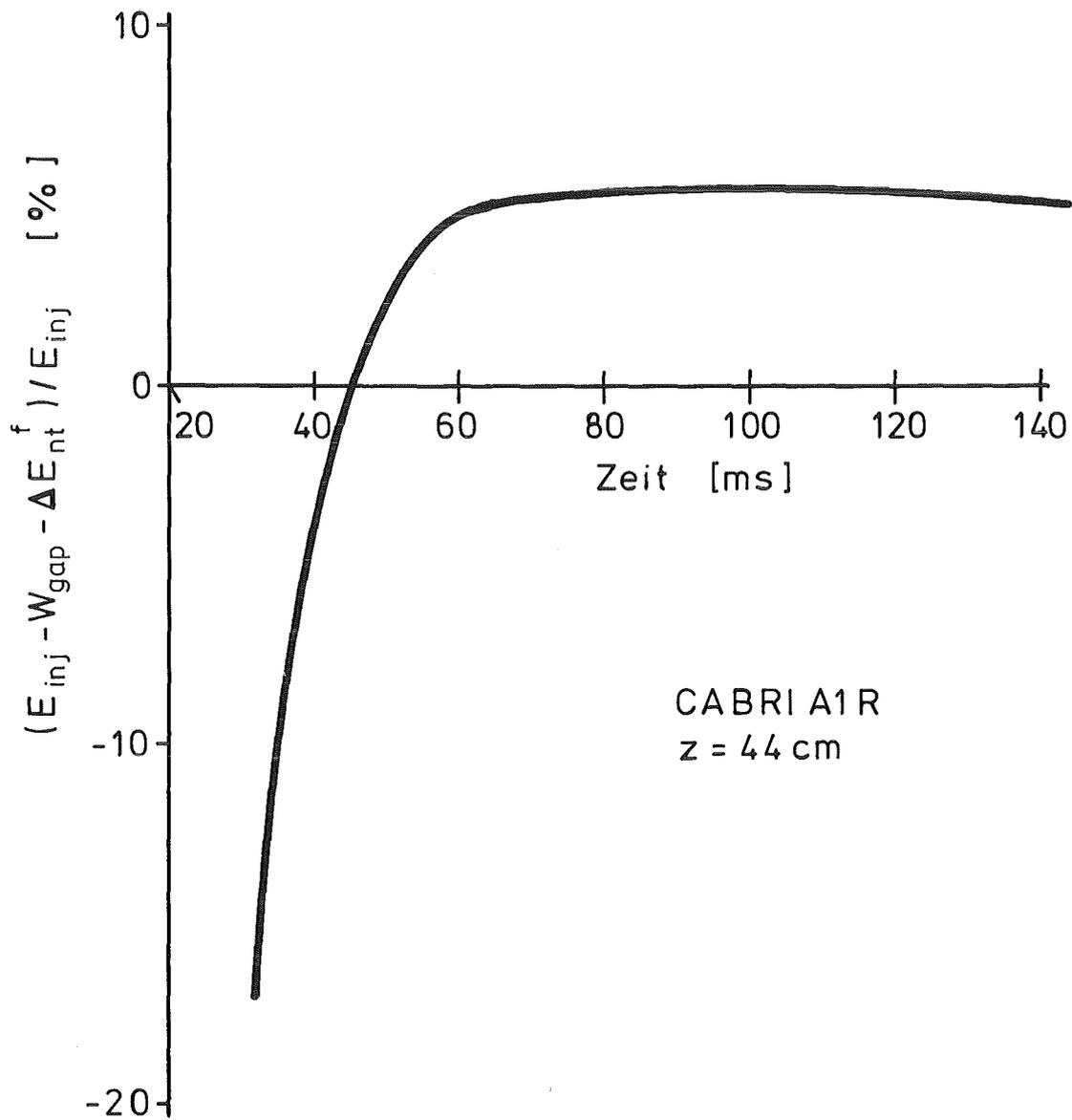


Abb.9 Abweichung der Summe aus Enthalpiezunahme im Brennstoff ΔE_{nt} und der zur Hülle abgeflossenen Wärmeenergie W_{gap} von der eingeschossenen Energie E_{inj} während des Leistungspulses

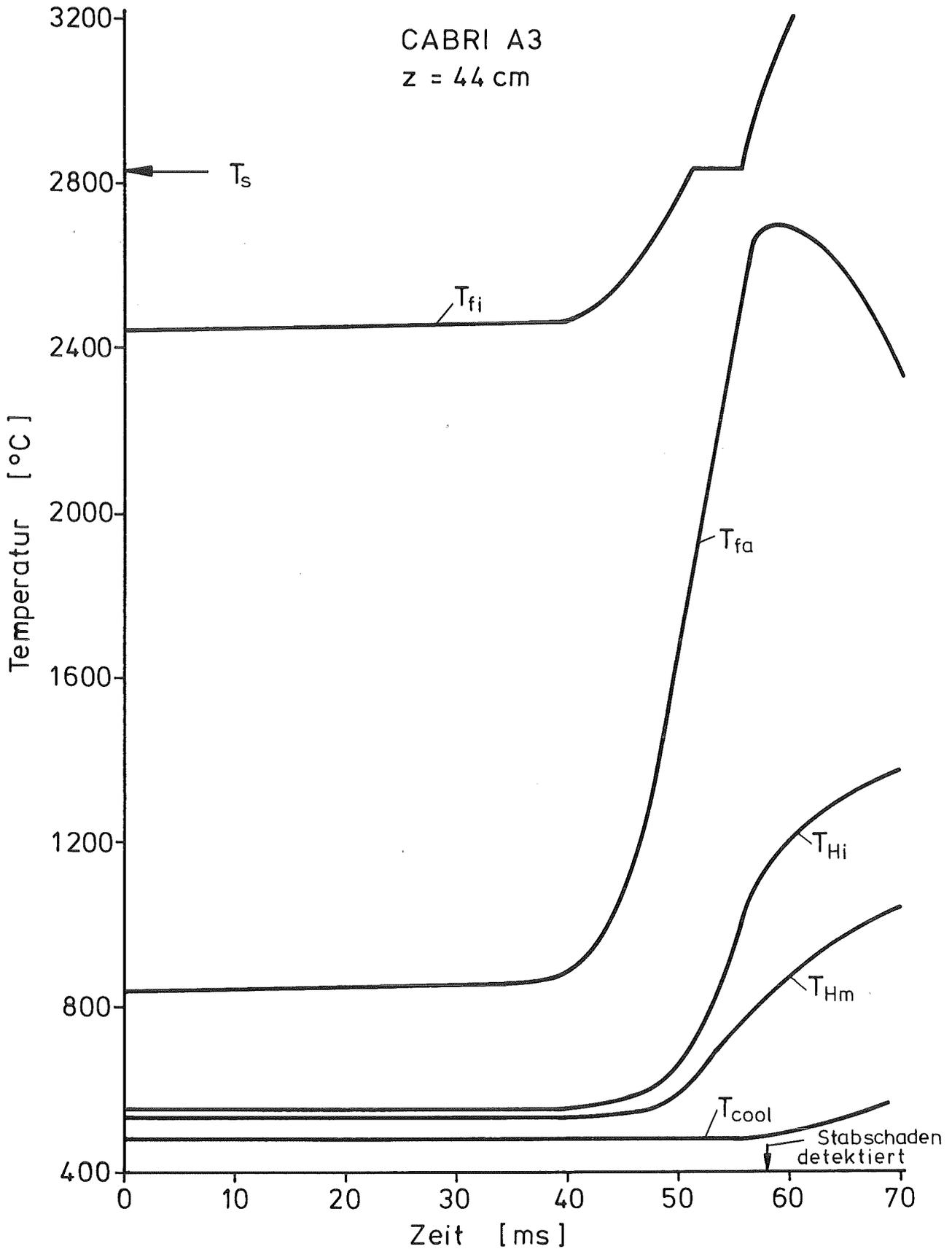


Abb.10 Zeitlicher Verlauf verschiedener charakteristischer Temperaturen in Brennstoff, Hülle und Kühlmittel für CABRI A3 auf Höhe von z = 44 cm BFC

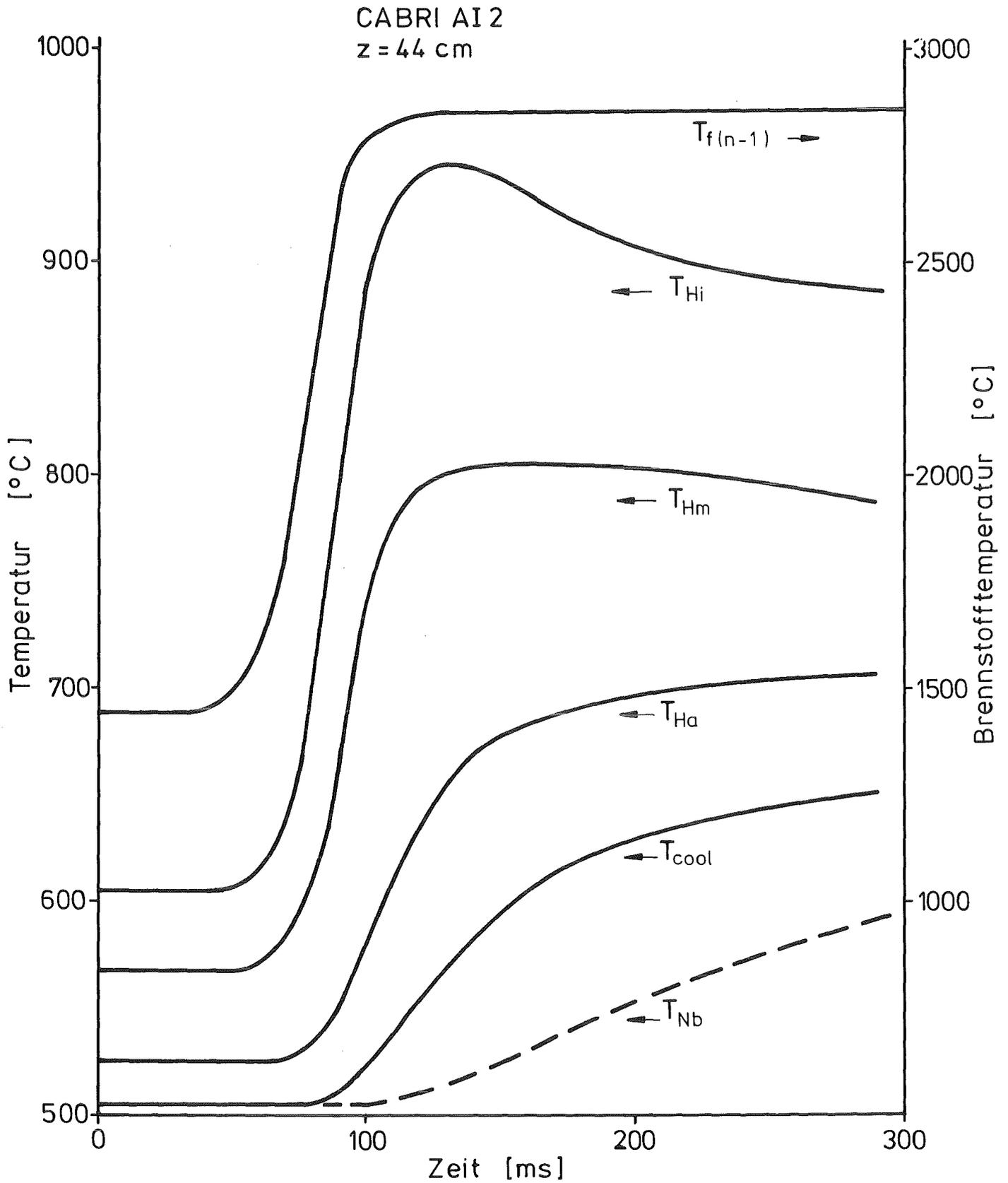


Abb. 11 Zeitlicher Verlauf verschiedener charakteristischer Temperaturen im Brennstoff, Hülle, Kühlmittel und Niob-Rohr für CABRI AI 2 auf Höhe von z=44 cm BFC

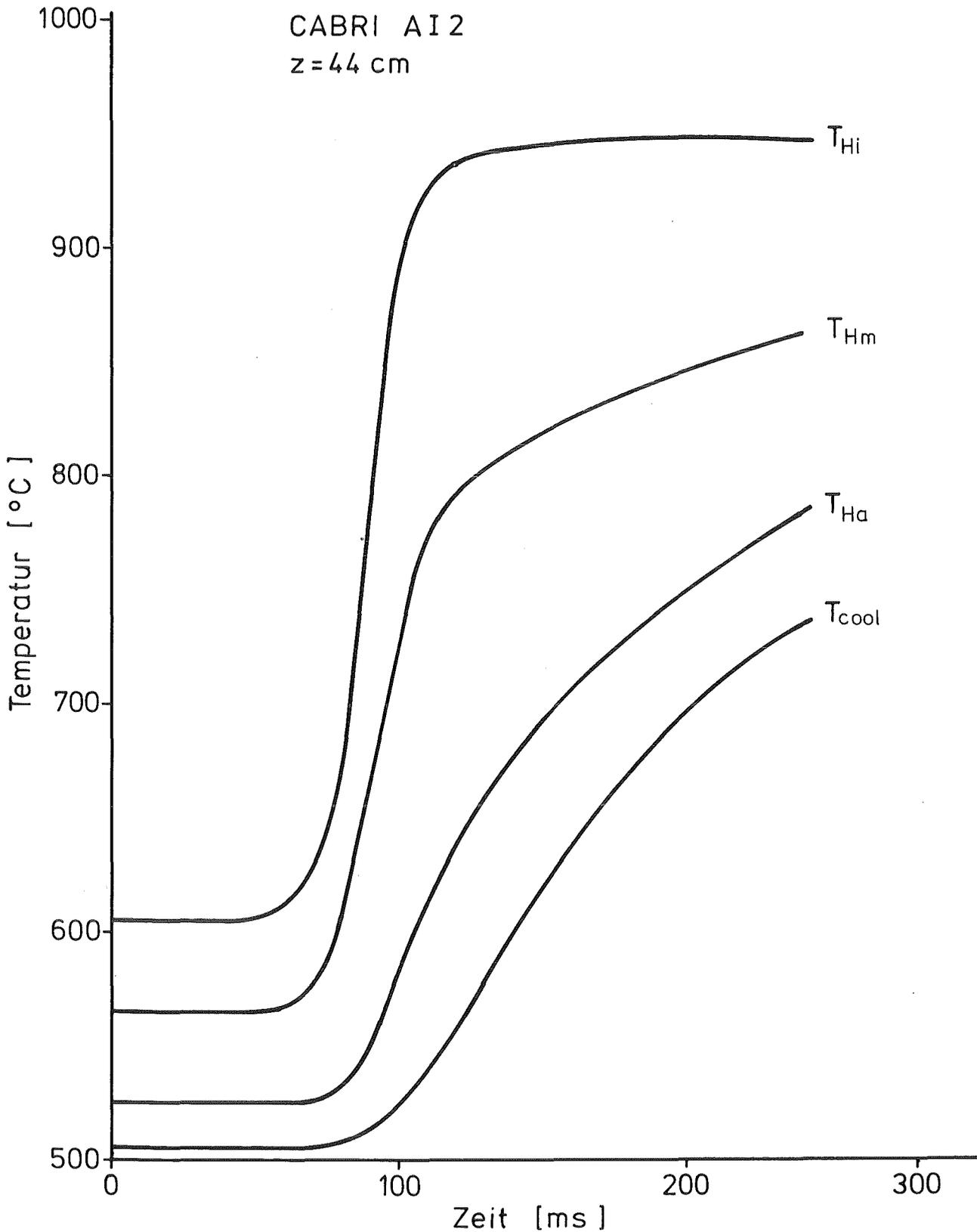


Abb. 12 Zeitlicher Verlauf einiger charakteristischer Temperaturen in Hülle und Kühlmittel für CABRI AI 2 ohne Wärmeübertragung ans Nb-Rohr

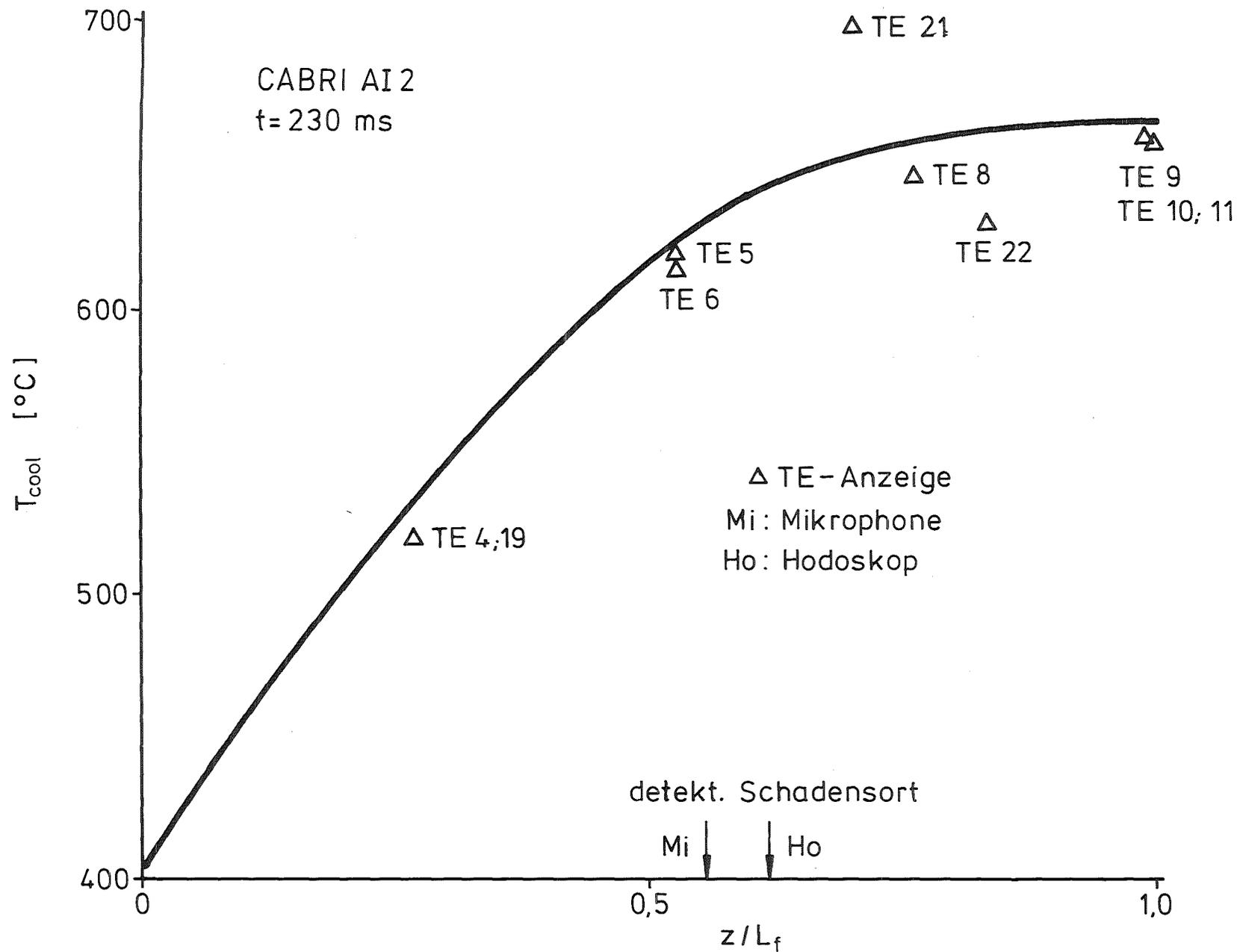


Abb.13 Vergleich des für CABRI AI2 gerechneten axialen Temperaturprofils im Kühlmittel mit den Thermoelementanzeigen zum Zeitpunkt des Stabschadens

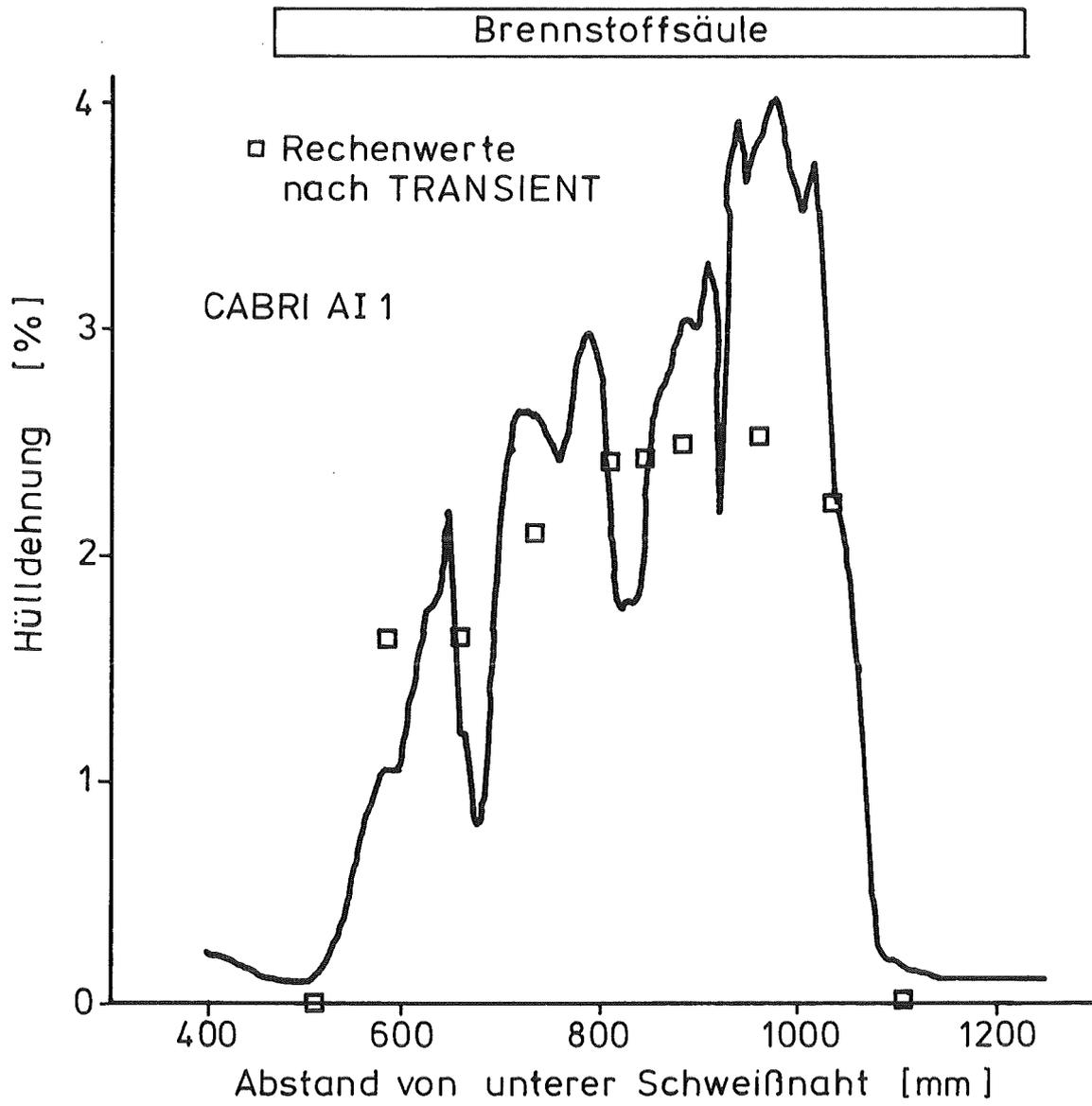


Abb. 14 Vergleich der gerechneten plastischen Hülldehnungen (□) mit den gemessenen

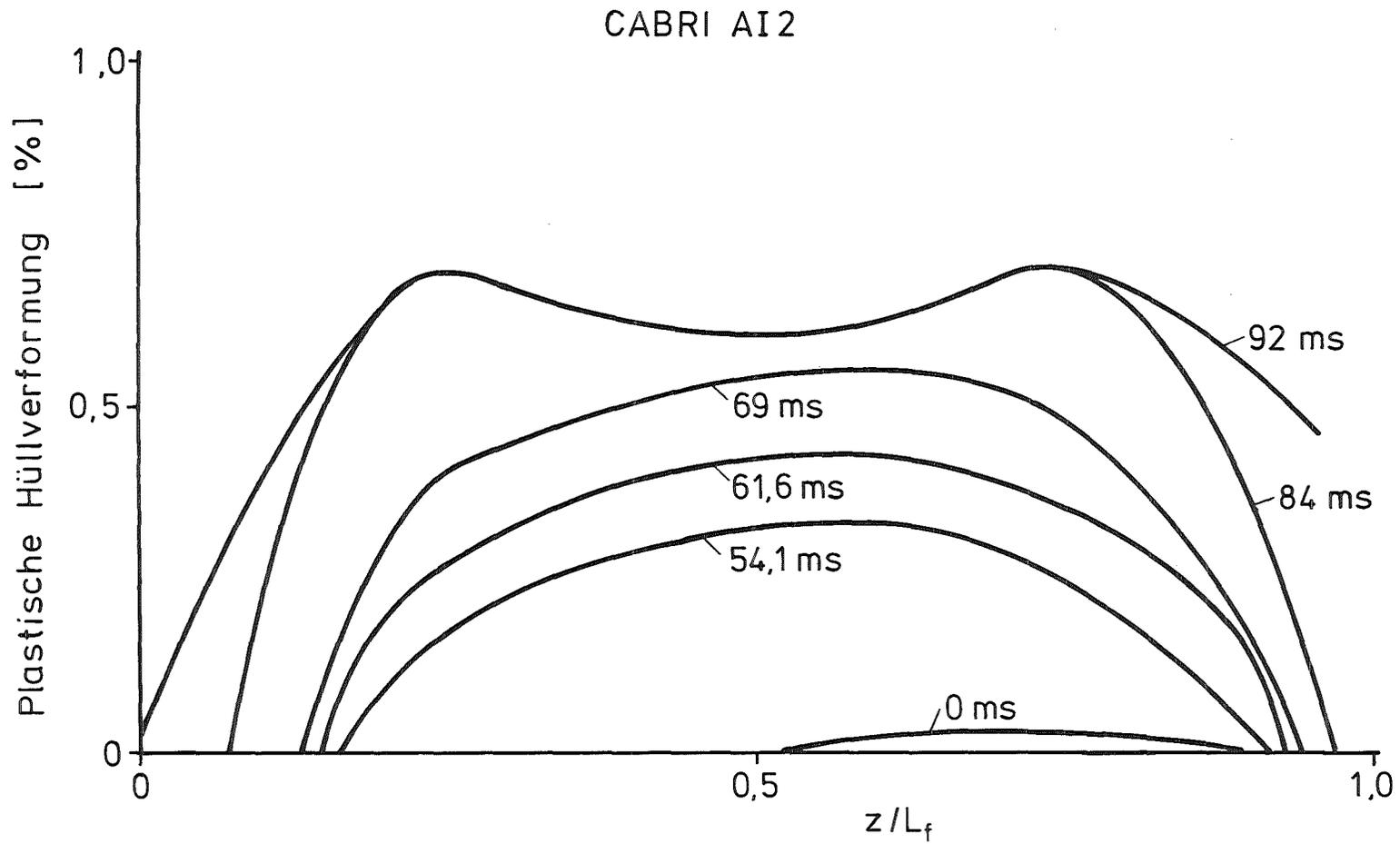


Abb.15 Hülldehnungsprofile beim AI2 zu verschiedenen Zeitpunkten während des Leistungspulses

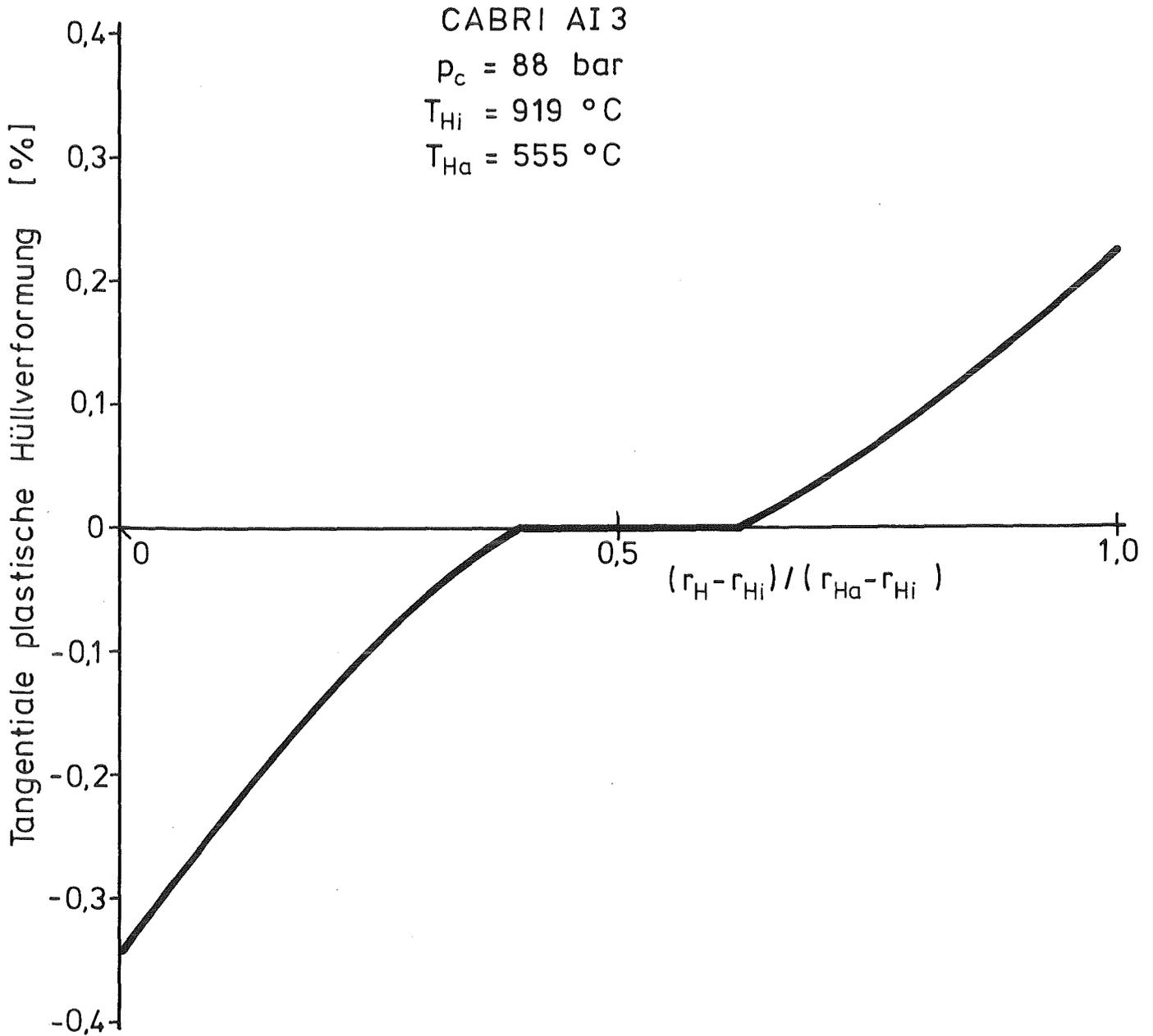


Abb. 16 Tangentiale plastische Hüllverformung über der Wandstärke durch Wärmespannungen beim CABRI AI 3-Experiment (nach C S T R E S S)

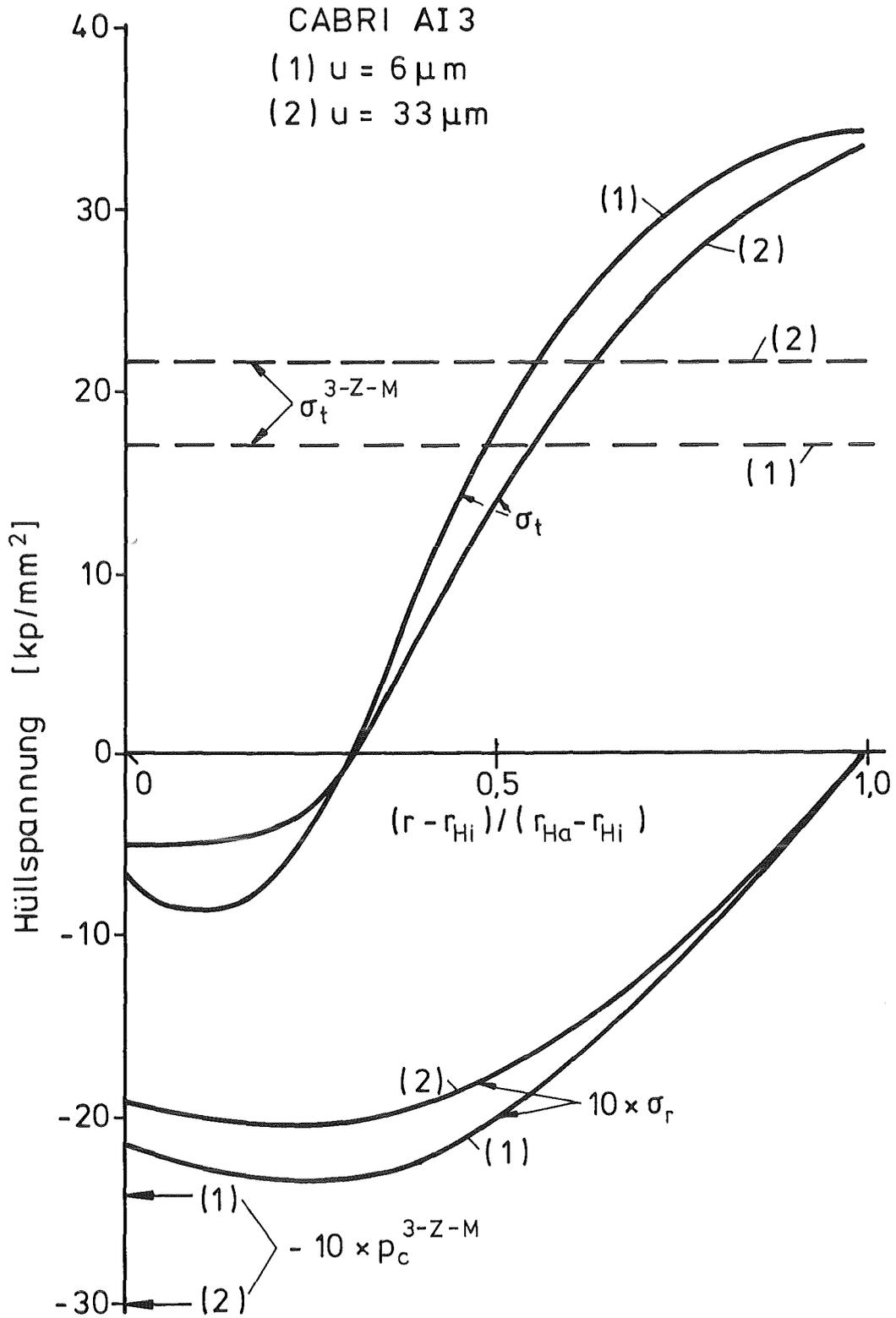


Abb. 17 Hüllspannungen und Kontaktdrücke nach der Transfermatrizen-Methode und dem Drei-Zonenmodell (3-Z-M) für CABRI AI3 (nach CSTRES)

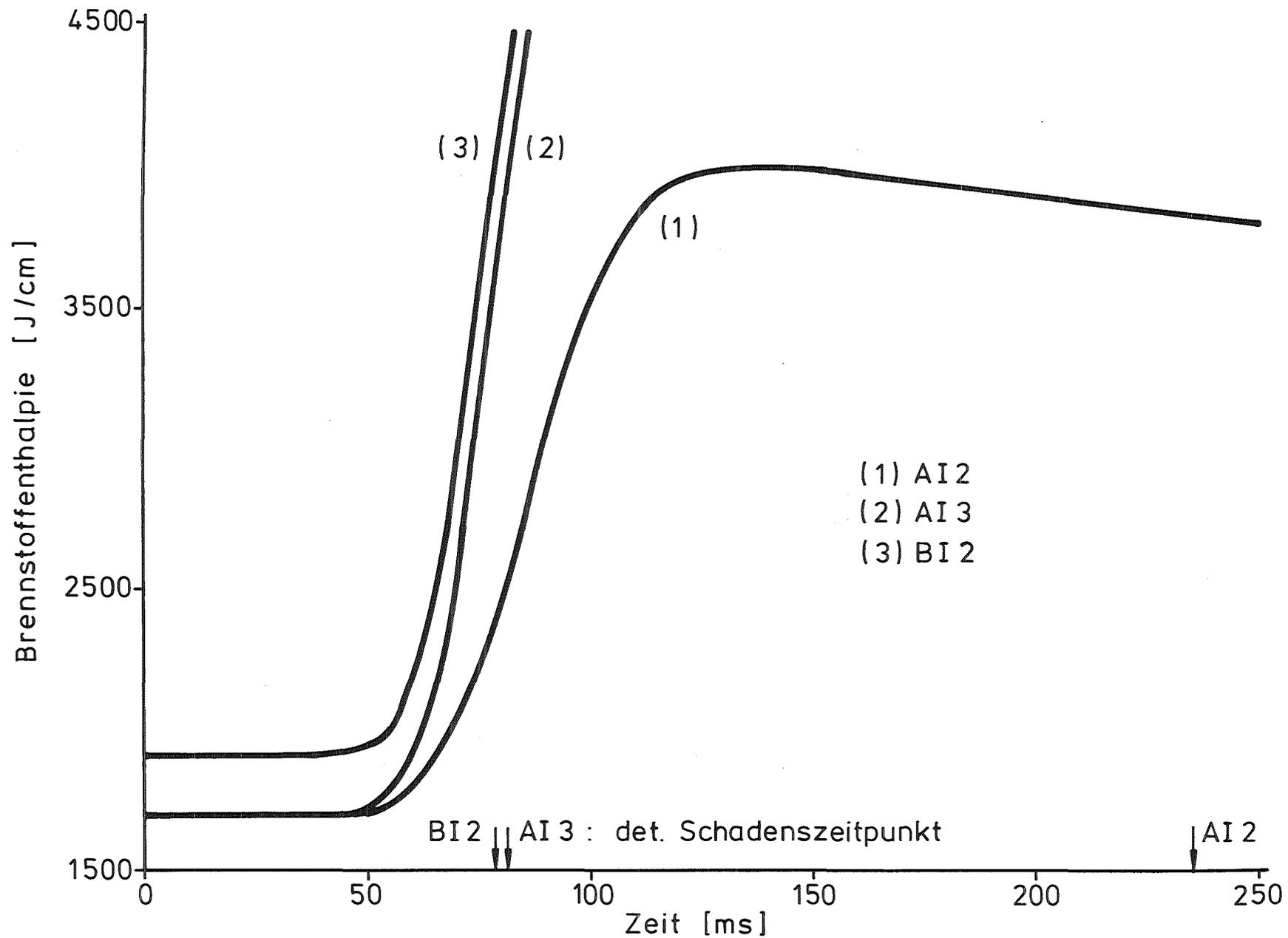


Abb. 18 Brennstoffenthalpie im Bereich der Schmelzzone für die drei CABRI-Experimente AI 2, BI 2 und AI 3

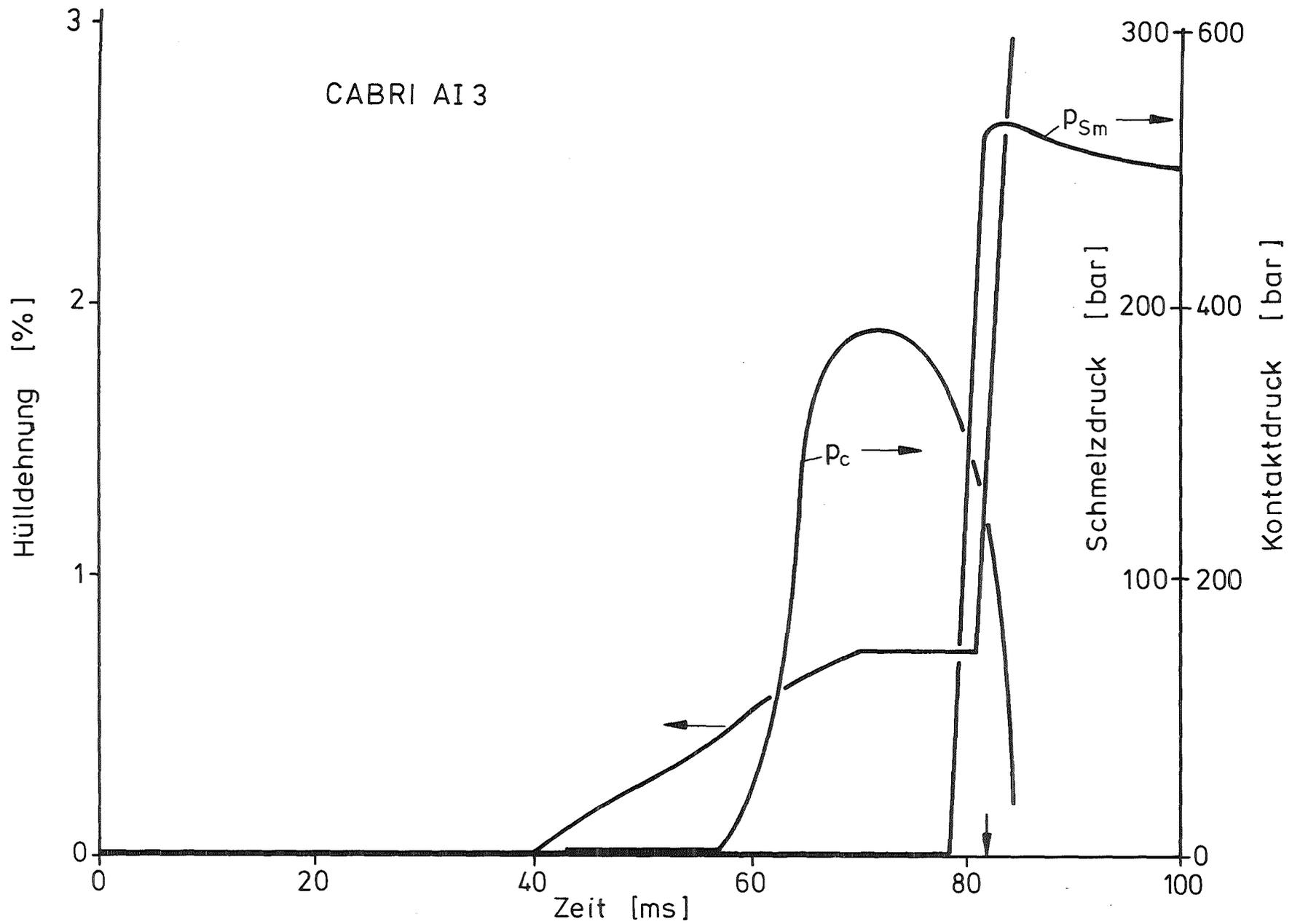


Abb. 19 Zeitlicher Verlauf der Hülldehnung an der Schadensstelle, der Kontaktdruck im oberen Teil der Brennstoffsäule p_c und des Schmelzdrucks p_{Sm}

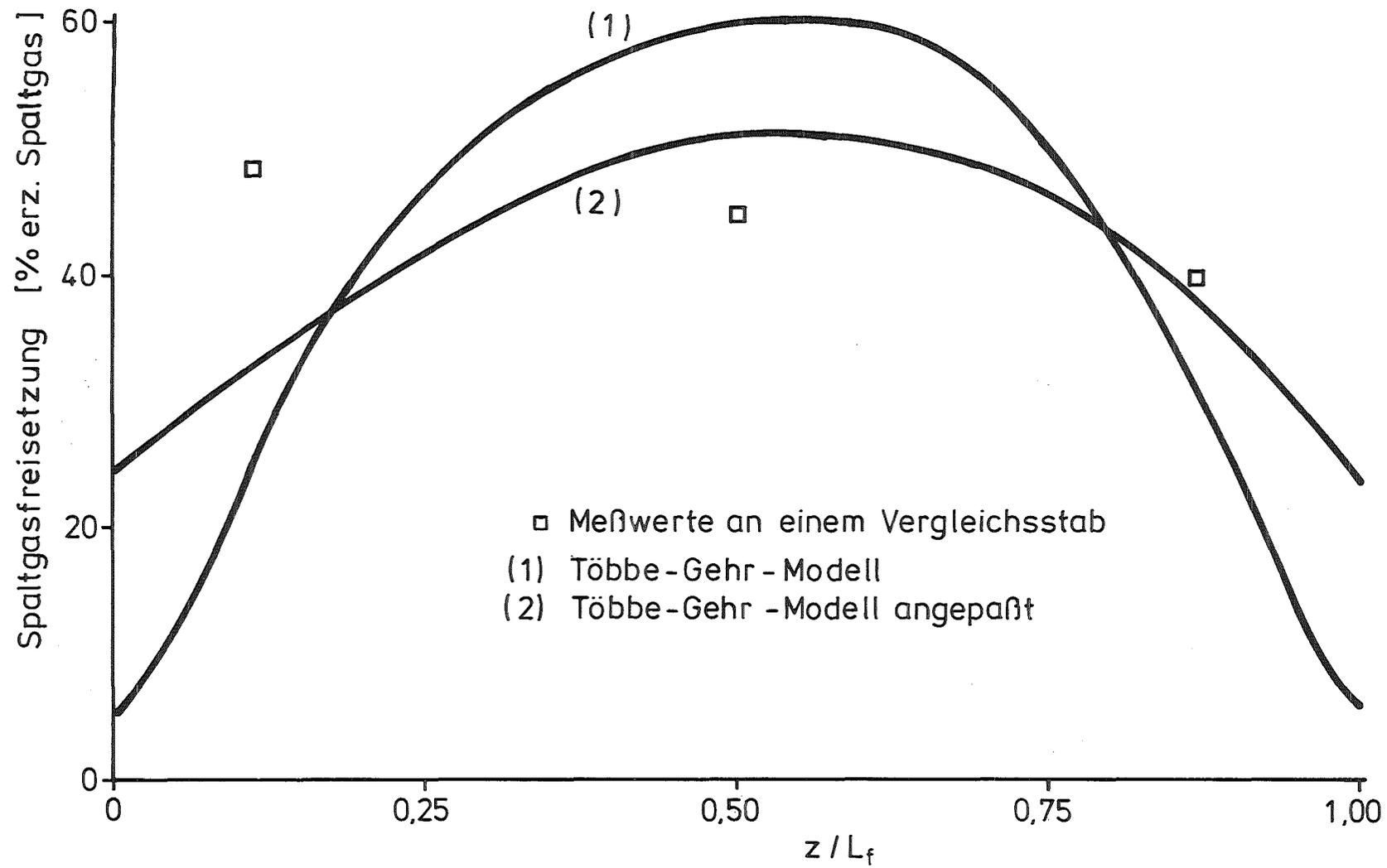


Abb.20 Spaltgasfreisetzung in den 1at % vorbestrahlten CABRI-Brennstäben zu Ende der stationären Vorbestrahlung

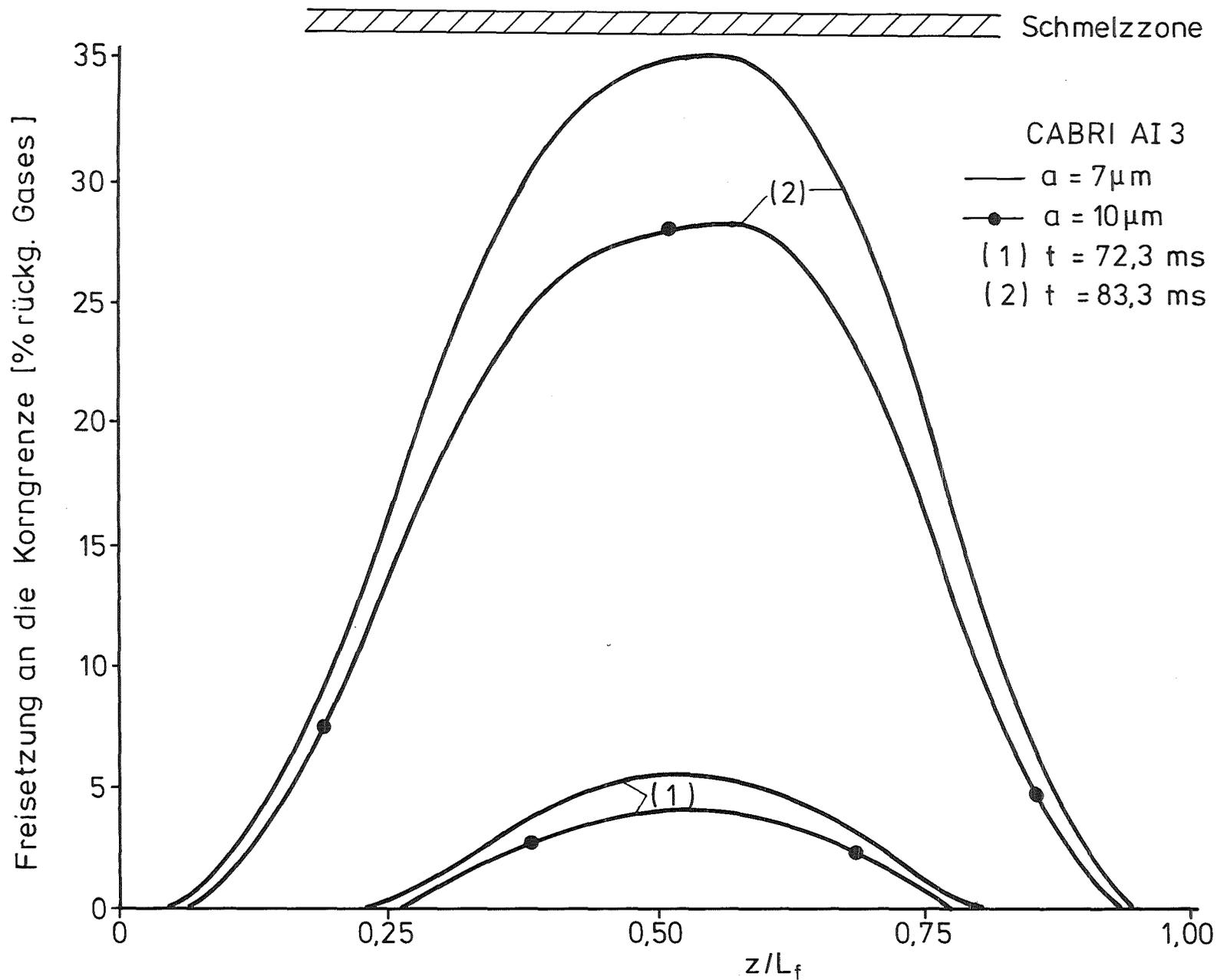


Abb. 21 Spaltgasfreisetzung an die Korngrenzen beim CABRI AI 3-Experiment zu zwei verschiedenen Zeitpunkten des Leistungspulses

A N H A N G

Inhalt:

Liste der verwendeten Unterprogramme	83
Beschreibung des Brennstabzustandes nach der stationären Vorbestrahlung	85
Schließen des Spaltes Brennstoff/Hülle	85
Umstrukturierung des Brennstoffs	85
Berechnung des Rißvolumens	86
Erläuterungen zur Lösung der instationären Wärmeleitungsgleichung in der Brennstofftablette	87
Ableitung der instationären Kühlmittelgleichung	92
Berechnung des Wärmestroms am Brennstoffaußenrand im WSTROF	94
Liste der Eingabedatei INP.DATA für einen Rechenlauf	96

Liste der verwendeten Unterprogramme

ALFF	thermischer Ausdehnungskoeffizient des Brennstoffs
AUSGAB	Ausgabe der wichtigsten Größen der Spaltgas-Verteilung im Brennstoff (stationär und instationär)
AXFLØ	Kühlmittel-Temperaturprofil bei $t = 0$
AXFLØI	instationäres Kühlmitteltemperaturprofil
CF	spezifische Wärme des Brennstoffs
CLADYS	Streckgrenze des verwendeten Hüllmaterials
CMELT	Schmelzradius in der Hülle
CPC	spezifische Wärme des Hüllmaterials
CRAVOL	Rißvolumen in der Brennstofftablette
DETCHE	Integration über Wärmequellendichte im Brennstoff zum Vergleich mit der aktuellen Stableistung
ENBILZ	Mittlere Brennstoff- und Hülltemperatur, Enthalpiezunahme in Brennstoff und Hülle, Wärmeabflüsse aus Brennstoff und Hülle bis zum Zeitpunkt t
ENTALF	Enthalpie des Brennstoffs bei $t = 0$
FGSTA	stationäres Spaltgasmodell, Spaltgasfreisetzung, Spaltgasrückhaltung
FGTRA	instationäres Spaltgasmodell, transiente Spaltgasfreisetzung und transientes Brennstoffschwellen
FMELT	Schmelzradien im Brennstoff, Schmelzdehnung
HF(T)	Brennstoff-Enthalpiefunktion
HGAPAR	Materialdaten für Wärmedurchgangsmodelle
LEIKU	lineare Stableistung und Massendurchsatz während der Transiente
MAXIMA	Bestimmung und Ausgabe von Maximalwerten und Temperaturen
PARCL	Materialdaten für das Hüllmaterial
PARFU	Materialdaten für den Brennstoff

PKONT	Berechnung des Kontaktdruckes nach dem Dreizonen-Modell
PLASTT	Modelle zur Berechnung der Plastizitätstemperatur im Brennstoff
PORVER	Porositätsverteilung in der Brennstofftablette
RESULT	Ausgabe der wichtigsten thermischen und mechanischen Größen
RHO	spezifisches Gewicht des Brennstoffs
STATVØ	Bedingungen für den stationären Vorbestrahlungs-Zustand
TEMPHI	Lösung der zeitabhängigen Wärmeleitungsgleichung für die Hülle
TEMPFI	Lösung der zeitabhängigen Wärmeleitungsgleichung für den Brennstoff
TEMPF	Lösung der stationären Wärmeleitungsgleichung für den Brennstoff
VARINT	Initialisierung der Rechengrößen
WDGAP	Wärmedurchgangsmodelle
WLF	Wärmeleitfähigkeit des Brennstoffs
WQVERT	Wärmequellendichteverteilung im Brennstoff
ZENTK	Umstrukturierung des Brennstoffs während der stationären Vorbestrahlung
MPRESS	Druckaufbau in der Brennstoffschmelze, Brennstofftransport im Zentralkanal, Brennstoffaustrag nach Stabversagen.
FUCRE	Brennstoffkriechen
CLACRE	Hüllkriechen
SIMQ	Lösungsverfahren für lineares Gleichungssystem
STAPEL	Abspeicherung von Rechengrößen
DACRIT	Hüllschadens-Funktionen
TBIL	Lösung der instationären WLG nach dem Bilanzenverfahren

Beschreibung des Brennstabzustandes nach der stationären Vorbestrahlung

In TRANSIENT ist eine Modellierung der wichtigsten Effekte der Vorbestrahlung implementiert, als da sind:

1. Spaltschließen Brennstoff/Hülle
2. Umstrukturierung des Brennstoffs
3. Spaltgasfreisetzung
4. Hüllschwellen, Hüllkorrosion.

Da die Behandlung der stationären Vorbestrahlungsphase nur dazu dient, den Ausgangszustand des Brennstabes für das transiente Experiment zu charakterisieren - man sich also nicht für die zeitlichen Abläufe interessiert -, ist es angebracht, auf einfache empirische Korrelation zurückzugreifen, die den Erfahrungsstand der Brennstabbestrahlungen widerspiegeln.

Schließen des Spaltes Brennstoff/Hülle

Es sind zwei empirische Korrelationen eingebaut:

i) Spaltschließformel nach Anselin /28/

$$\delta = \delta_0 (1,296 \exp(-2212 \cdot /T_z) \cdot t_{VLT}^{0,1685})$$

ii) Spaltschließformel nach Dutt /29/

$$\delta = \delta_0 \left[\frac{0,7264 \cdot A}{200 \cdot \delta_0} + 0,365 (1 - \exp(0,24683 \cdot \chi \cdot A)) + 4,853 \cdot 10^{-6} \chi (\chi - 191,4) (1 - \exp(-ZYK)) \right]$$

Umstrukturierung des Brennstoffs

Es werden die folgenden Größen bestimmt: Zentralkanalradius, Grenze der Säulenkristallzone, Rißausheilungsradius und Rißvolumen.

Der Zentralkanal ist schon nach wenigen Tagen voll ausgebildet. Man braucht also hier keine Abbrandabhängigkeit berücksichtigen. Die folgende im IMF I /3/ erarbeitete Korrelation gibt die experimentellen Daten gut wieder

$$r_{fi} = r_{fa} \cdot \sqrt{P_{smear} \cdot f(\chi, P_{smear})}$$

$$f(\chi, P_{smear}) = 1,04 \cdot 10^{-3} \frac{\chi}{1 - 2 \cdot P_{smear}} - 0,3$$

$$f(\chi, P_{smear}) \leq 0,6$$

Für die Porositätsverteilung wird die folgende einfache Stufenfunktion eingegeben:

$$P = P_{Fe} \quad \text{für} \quad r > r_{colum}$$
$$= P_{colum} \quad \text{für} \quad r \leq r_{colum}$$

Der Grenzradius der Säulenkristallzone wird über die Temperaturbedingung

$$T_{colum} = 1800 \text{ } ^\circ\text{C} \quad \text{bestimmt.}$$

Berechnung des Rißvolumens

Das Rißvolumen zu Ende der Vorbestrahlung in einem Brennstoffzylinder der Einheitslänge wird folgendermaßen berechnet

$$V_{Riss,0} = \left(V_{gap} - V_{sw}^f \right) \frac{r_{fa} - r_{hea}}{r_{fa}}$$

V_{gap} = Volumengewinn durch Spaltschließen

V_{sw}^f = Volumenzunahme durch Festkörperbrennstoffschwellen

$$\Delta V_{gap} = 2\pi \cdot r_{fa} \cdot \Delta \delta$$

$$\Delta V_{sw}^f = \frac{2}{3} S_{FK}^f \cdot A \cdot F_{Pellet}$$

S_{FK} : Schwellrate durch feste Spaltprodukte

Der Rißausheilungsradius wird über die Temperaturbedingung

$$T_{heal} = 1700 \text{ } ^\circ\text{C} \text{ berechnet.}$$

Die Abbrandabhängigkeit von r_{heal} wird im Moment noch nicht berücksichtigt, d.h. die Beschreibung ist nur bei kleinen Abbränden gültig.

Erläuterungen zur Lösung der instationären Wärmeleitungsgleichung in der Brennstofftablette

Die Lösung der instationären Wärmeleitungsgleichung erfolgt im Unterprogramm TEMPFI. Vor der Beschreibung des eigentlichen Lösungsverfahrens soll aber noch die Herleitung von Gleichung (6) angegeben werden, da in TEMPFI mit nicht-äquidistanten Stützstellen operiert wird.

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right|_{r=r_i} = \frac{\left(\frac{\Delta T}{\Delta r}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\Delta T}{\Delta r}\right)_{i-\frac{1}{2}}}{(\Delta r_i + \Delta r_{i-1}) / 2} \quad (\text{A1})$$

$$\left(\frac{\Delta T}{\Delta r}\right)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta r_i} \quad (\text{A2})$$

$$\left(\frac{\Delta T}{\Delta r}\right)_{i-\frac{1}{2}} = \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta r_{i-1}} \quad (\text{A3})$$

(A2) und (A3) in (A1) eingesetzt führt auf (A6).

Gleichung (2) auf die Stützstellen $i = 1 \dots n$ angewendet, ergibt ein Gleichungssystem der folgenden Form:

Durch Umordnung erhält dieser Term die folgende Form:

$$\begin{aligned}
 & \left((\lambda_{i+1}^{k+1} - \lambda_{i-1}^{k+1}) / \lambda_i^{k+1} \hat{=} \hat{\lambda}_i^{k+1} \right) \\
 T_{i+1}^{k+1} & \frac{\frac{2}{\Delta r_i} + \frac{1}{r_i} + \frac{\hat{\lambda}_i^{k+1}}{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i}}{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i} + T_{i-1}^{k+1} \frac{\frac{2}{\Delta r_{i-1}} - \frac{1}{r_i} - \frac{\hat{\lambda}_i^{k+1}}{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i}}{\Delta r_{i-1} + \Delta r_i} \\
 & - T_i^{k+1} \cdot \frac{2}{\Delta r_i \cdot \Delta r_{i-1}} \tag{A7}
 \end{aligned}$$

Man kann leicht nachvollziehen, daß dies im Grenzfall äquidistanter Stützstellen:

$$\Delta r_{i-1} \leq \Delta r_i = \Delta r$$

identisch ist mit:

$$\begin{aligned}
 T_{i+1}^{k+1} & \left(\frac{1}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{2 \cdot r_i \cdot \Delta r} + \frac{\hat{\lambda}_i^{k+1}}{4(\Delta r)^2} \right) + T_{i-1}^{k+1} \left(\frac{1}{\Delta r^2} - \frac{1}{2 \cdot r_i \cdot \Delta r} - \frac{\hat{\lambda}_i^{k+1}}{4(\Delta r)^2} \right) \\
 & = T_i^{k+1} \frac{2}{(\Delta r)^2} \tag{A8}
 \end{aligned}$$

Die Randbedingung am Innenradius der Brennstofftablette lautet in finiter Schreibweise:

$$\frac{T_0^{k+1} - T_2^{k+1}}{\Delta r_0 + \Delta r_1} = 0 \Rightarrow T_0^{k+1} = T_2^{k+1} \tag{A9}$$

Für die 1. Stützstelle ergibt sich also aus (A7):

$$\begin{aligned}
 & (\Delta r_0 = \Delta r_1) \\
 T_2^{k+1} & \cdot \frac{2}{(\Delta r_1)^2} - T_i^{k+1} \frac{2}{(\Delta r_1)^2} \tag{A10}
 \end{aligned}$$

Für die n-te Stützstelle erhält man mit Hilfe von:

$$(\Delta r_n \equiv \Delta r_{n-1})$$

$$-\lambda_n^{k+1} \frac{T_{n+1}^{k+1} - T_{n-1}^{k+1}}{2 \cdot \Delta r_{n-1}} = h_{\text{gap}} \cdot (T_n^{k+1} - T_{H_i}^{k+1}) \quad (\text{A11})$$

den folgenden Ausdruck auf der linken Seite der Gleichung (A4):

$$T_{n-1}^{k+1} \frac{2}{(\Delta r_{n-1})^2} - T_n^{k+1} \left[\frac{2}{(\Delta r_{n-1})^2} + \frac{h_{\text{gap}} \cdot 2 \cdot \Delta r_{n-1}}{\lambda_n^{k+1}} \cdot \frac{\frac{2}{\Delta r_{n-1}} + \frac{1}{r_n} + \frac{\hat{\lambda}_n^{k+1}}{2 \cdot \Delta r_{n-1}}}{2 \cdot \Delta r_{n-1}} \right] \quad (\text{A12})$$

Auf die rechte Seite der n-ten Gleichung wird der folgende Ausdruck geschoben:

$$T_{H_i} \cdot \frac{h_{\text{gap}} \cdot 2 \cdot \Delta r_{n-1}}{\lambda_n^{k+1}} \cdot \frac{\frac{2}{\Delta r_{n-1}} + \frac{1}{r_n} + \frac{\hat{\lambda}_n^{k+1}}{2 \cdot \Delta r_{n-1}}}{2 \cdot \Delta r_{n-1}} \quad (\text{A13})$$

Es sei noch erwähnt, daß in TEMPFI die Glieder mit λ_n^{k+1} vernachlässigt werden, da sie verschiedentlich zu numerischen Instabilitäten geführt haben. Des weiteren wird für

$$(h_{\text{gap}} \cdot 2 \cdot \Delta r_{n-1}) / \lambda_n^{k+1}$$

die Variable HTR eingeführt und es wird in allen Gleichungen der Ausdruck $\frac{1}{\Delta r_{i-1} \cdot \Delta r_i}$ vor die geschweifte Klammer der Gleichung (2) gezogen.

Die Ausdrücke werden dann noch mit den entsprechenden Vorfaktoren

$$-\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{(\rho \cdot c_p)_i^{k+1}} \lambda_i^{k+1} \text{ multipliziert und dazu noch } T_i^{k+1} \text{ addiert. Damit ist die Matrix } \tilde{A} \text{ aufgebaut.}$$

Die Matrixgleichung (A5) wird in TEMPFI mit Hilfe des Unterprogramms SIMQ gelöst. Dieses Unterprogramm verlangt, daß die Matrix \tilde{A} in Form eines Vektors $\vec{\tilde{A}}$ eingegeben wird, und zwar wird $\vec{\tilde{A}}$ durch Verkettung der Spalten von \tilde{A} gewonnen. Es gilt also:

$$\hat{a}_\ell = \tilde{a}_{ij} \quad \text{mit } \ell = (j-1) \cdot n + i \quad (\text{A14})$$

Für die Glieder der Hauptdiagonale \tilde{a}_{ii} gilt

$$l = (i-1) \cdot n + i \quad (\text{A15})$$

für die untere Nebendiagonale $\tilde{a}_{i+1,i}$

$$l = i \cdot n + i \quad (\text{A16})$$

und für die der oberen Nebendiagonale $\tilde{a}_{i,i+1}$

$$l = (i-1) \cdot n + i+1 \quad (\text{A17})$$

Die Glieder des Vektors \vec{D} auf der rechten Seite von (A5) werden folgendermaßen gewonnen:

1. Es wird zeilenweise $\tilde{A}(t)$ mit \vec{T}^k multipliziert

$$\hat{d}_i = - \sum_{j=1}^n \tilde{a}_{ij}(t) T_j^k \quad (\text{A18})$$

2. Es wird addiert:

$$D_i = \hat{d}_i + 2 T_i^k + \frac{1}{2} \Delta t \cdot \left[\frac{q_i^{k+1}}{(\rho \cdot c_p)_i^{k+1}} + \frac{q_i^k}{(\rho \cdot c_p)_i^k} \right] \quad (\text{A19})$$

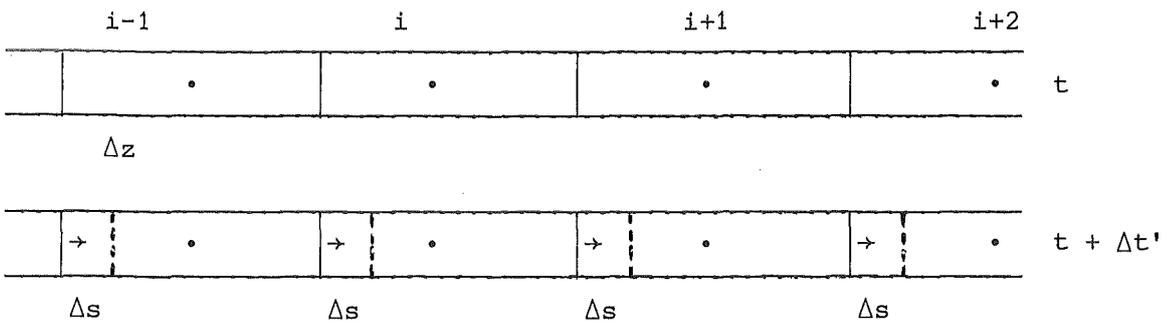
3. Aufgrund der Randbedingung (A11), die für t und $t + \Delta t$ anzuwenden ist, wird bei D_n noch der folgende Term hinzugefügt.

$$\frac{1}{2} \Delta t \cdot \left[\frac{h_{\text{gap}}^{k+1}}{(\rho \cdot c_p)_n^{k+1}} \cdot T_{Hi}^{k+1} \left(\frac{2}{\Delta r_{n-1}} + \frac{1}{r_n} \right) + \frac{h_{\text{gap}}^k}{(\rho \cdot c_p)_n^k} \cdot T_{Hi}^k \cdot \left(\frac{2}{\Delta r_{n-1}} + \frac{1}{r_n} \right) \right] \quad (\text{A20})$$

Da zum neuen Zeitpunkt die Materialwerte an den Stützstellen λ_i^{k+1} und $(\rho \cdot c_p)_i^{k+1}$ zu Beginn nicht bekannt sind, muß iteriert werden. Im ersten Durchgang werden dazu die Materialwerte zum Zeitpunkt t benutzt.

Ableitung der instationären Kühlmittelgleichung

Die Bilanzgleichung (11) soll durch folgende Skizze eines Kühlkanalabschnitts verdeutlicht werden:



Die Wärmemenge, die im Zeitintervall $\Delta t'$ in das i -te Volumensegment der Länge Δz transportiert wird, ist gegeben durch:

$$Q = j_i \cdot \Delta t' \cdot \Delta z \quad (B1)$$

Wenn das Kühlmittel nicht in Bewegung ist, dann ergibt sich die Aufheizung $\Delta T_{cool,i}$ aus folgender Beziehung:

$$\Delta z \frac{\dot{m}}{v^{cool}} \cdot C_{p,i}^{cool} \cdot \Delta T_{cool,i} = Q_i \quad (B2)$$

Im Zeitintervall $\Delta t'$ bewegt sich das Kühlmittel um $\Delta s = v^{cool} \cdot \Delta t'$ vorwärts.

Die Kühlmittelsegmente in TRANSIENT sind ortsfest. Durch die Kühlmittelbewegung werden die folgenden Wärme- und Enthalpiemengen im i -ten Segment hin- und wegtransportiert.

$$Q_i' = \frac{1}{2} v^{cool} \cdot (\Delta t')^2 (j_{i-1} - j_i) \quad (B3)$$

$$Ent_i' = \dot{m} \Delta t' (C_{p,i-1}^{cool} \cdot T_{cool,i-1} - C_{p,i}^{cool} \cdot T_{cool,i}) \quad (B4)$$

Die Gleichung (B2) geht also über in :

$$\Delta z \cdot \frac{\dot{m}}{v^{cool}} \cdot C_{p,i}^{cool} \cdot \Delta T_{cool,i} = Q_i + Q_i' + Ent_i' \quad (B5)$$

Dieses einfache Verfahren ist nur gültig, solange

$$\Delta s < \Delta z/2 \quad \text{gilt.} \quad (\text{B6})$$

Das Zeitintervall $\Delta t'$ muß dementsprechend gewählt werden. Falls also das vom Hauptprogramm vorgegebene Zeitinkrement Δt

$$v \cdot \Delta t < \Delta z/2.$$

nicht erfüllt, erfolgt eine Zeitintervallkürzung im Unterprogramm AXFLOI.

A. W. Cronenburg et al. /34/ geben die folgende Differentialgleichung für das Kühlmittel an:

$$\rho \cdot C_p \cdot V_m \cdot \frac{\partial T_m}{\partial t} = \dot{q} - \rho \cdot C_p \cdot V_m \cdot \dot{x} \cdot \frac{\partial T_m}{\partial x} \quad (\text{B7})$$

$$\dot{x} = v^{\text{cool}} \quad \dot{q} \hat{=} j \cdot \Delta z$$

$$\rho \cdot V_m = \Delta z \cdot \frac{\dot{m}}{v^{\text{cool}}}$$

Damit kommt man auf folgende finite Differenzengleichung:

$$\Delta z \frac{\dot{m}}{v^{\text{cool}}} \cdot C_{p,i}^{\text{cool}} \cdot \frac{\Delta T^{\text{cool},i}}{\Delta t} = j_i \cdot \Delta z + \frac{1}{2} \cdot \dot{m} \left[C_{p,i}^{\text{cool}}(t) (T_{i-1}^{(t)} - T_i^{(t)}) + C_{p,i}^{\text{cool}}(t+\Delta t) (T_{i-1}(t+\Delta t) - T_i(t+\Delta t)) \right] \quad (\text{B8})$$

Der 2. Term auf der rechten Seite läßt sich umformen zu:

$$\frac{1}{2} \dot{m} \left[C_{p,i}(t) (T_{i-1}^{(t)} - T_i(t)) + C_{p,i}(t+\Delta t) (T_{i-1}(t+\Delta t) - T_i(t+\Delta t)) \right]$$

$$= \dot{m} C_{p,i}(t) (T_{i-1}^{(t)} - T_i(t)) + \frac{1}{2} \dot{m} \left[C_{p,i}(t+\Delta t) (T_{i-1}(t+\Delta t) - T_i(t+\Delta t)) - C_{p,i}(t) (T_{i-1}(t) - T_i(t)) \right] \quad (\text{B9})$$

Wenn man dann noch die folgende Relation berücksichtigt, die in guter Näherung gültig ist,

$$\frac{1}{2} \dot{m} \left[C_{p,i}(t+\Delta t) (T_{i-1}(t+\Delta t) - T_i(t+\Delta t)) - C_{p,i}(t) (T_{i-1}(t) - T_i(t)) \right] \quad (B10)$$

$$\approx \frac{1}{2} v_{\text{cool}} \cdot \Delta t (j_{i-1} - j_i)$$

dann kommt man auf die Gleichung (11)

Berechnung des Wärmestroms am Brennstoffaußenrand in WSTROF

Der Wärmestrom am Brennstoffrand ist wie folgt mit der Temperaturdifferenz im Spalt verknüpft:

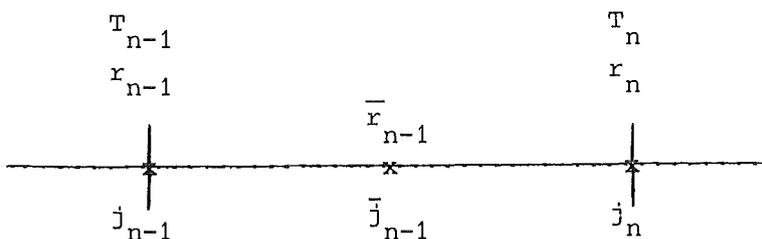
$$j_{fa/2\pi r} = - \lambda_f \left. \frac{\partial T_f}{\partial r} \right|_{r_{fa}} = h_{\text{gap}} \cdot \Delta T \quad (C1)$$

Da die Berechnung der Brennstoff- und Hülltemperaturen nach einem numerischen Verfahren erfolgt, weichen in der Regel die Temperaturwerte von ihren theoretischen Werten ab. Je nachdem ob die berechnete Brennstoffrandtemperatur über oder unter dem theoretischen Wert liegt, ist also der Wärmestrom kleiner oder größer als er dem Temperatursprung im Spalt entspricht.

Um dies etwas auszugleichen, wird in TRANSIENT der Wärmestrom durch arithmetische Mittelung gebildet:

$$j_{fa/2\pi r} = \frac{1}{2} \left[h_{\text{gap}} \cdot \Delta T - \lambda_f \cdot \frac{\partial T_f}{\partial r} \right] \quad (C2)$$

Der Wärmestrom am Tablettenrand wird über eine Bilanzgleichung bestimmt, wie durch die folgende Skizze veranschaulicht wird:



Gegeben ist \bar{j}_{n-1} der Wärmestrom in der Mitte der letzten Ringfläche

$$\bar{j}_{n-1} = - \bar{\lambda}_{f,n-1} \frac{T_n - T_{n-1}}{r_n - r_{n-1}} \cdot 2\pi \bar{r}_{n-1} \quad (C3)$$

Der Wert von j_n berechnet sich dann aus folgender Beziehung durch Ansetzen der Wärmeleitungsgleichung für die letzte halbe Ringfläche in finiter Form:

$$j_n = \bar{j}_{n-1} + 2\pi r_n \cdot (r_n - \bar{r}_{n-1}) \cdot \left[\frac{1}{2} (q_n(t) + q_n(t+\Delta t)) - \rho_n \cdot c_{p,n} \cdot \Delta T_n / \Delta t \right] \quad (C4)$$

Es wurde dabei noch verwendet:

$$\Delta T_n \approx \frac{1}{4} \Delta T_{n-1} + \frac{3}{4} \Delta T_n \quad q_n \approx \frac{1}{4} q_{n-1} + \frac{3}{4} q_n \quad (C5)$$

$$\Delta T_n = T_n(t + \Delta t) - T_n(t)$$

Liste der Eingabedatei INP.DATA für einen Rechenlauf

.0092	BU	ABBRAND IN SPALTG/SCHW. AT.
.1547	CPU	PU/(U + PU), --
22.	PCOOL	KUEHLMITTELDRUCK, N/CM**2
10.	PEIN	FUELLGAS-EINFUELLDRUCK, N/CM**2
1.977	OME	O/ME-VERHAELTNIS, --
0.47	FLU	FLUSSABSENKUNG, PHI(RFI)/PHI(RFA), --
0003	MATNR	KENNZAHL HUELLMATERIAL
.3803	RHA	HUELLWAND-AUSSENDMR., CM
.3299	RHI	HUELLINNEN-DMR., CM
.820	RNBA	AUSSENADIUS DES NIOBROHRS, CM
.600	RNBI	INNENRADIUS DES NIOBROHRS, CM
.075	POR	BRENNSTOFF-SINTERPOROSITAET, VOL.ANT.
.04	PORCOL	POROSITAET IN DER SAEULENKRYSTALLZONE
.005	PORINK	INKOMPRESSIBLE POROSITAET
0.0	DISHV	LEERVOL ANTEIL DISHING, --
.3200	RFA	PELLET-AUSSENDMR., CM
.0000	RFI	PELLET-INNENDMR., CM
5.00000E-4	RRAU	BRENNSTOFF-RISSRAUHIGKEIT, CM
.55	FANSEC	VORGEGEBENER SPALTSCHLIESSGRAD, --
0001	IREAC	VORBESTRAHLUNG IN SCHNELLEM REAKTOR
0001	IRAMP	STUFENWEISE BERECHNUNG PRAETRANS.
0000	IRAMU	ANFAHRRAMPE OHNE UNTERBRECHUNG
300.	ZRAMU	HALTEZEIT WAEHREND DER ANFAHRRAMPE IN SEC
500.	CHINOU	LEISTUNGSPLATEAU BEI DER ANFAHRRAMPE
0002	IFORM	PULSFORM RAMPE MIT SCRAM
0015	ISKIP	RECHENSCHRITTE/AUSGABESCHRITTE
0001	ISCPR	KONTROLLAUSGABE AUF SCHIRM UNTERDRUECKT
0001	IGAS	SPALTGASRECHNUNG DURCHFUEHREN
0001	IAXG	(1=SLIP, 0=NOSLIP)
0001	IFU = 1	BEZEICHNET OXIDBRENNSTOFF
0001	IFUTRA = 1	BR.TRANS. TRANSPORT IM ZENT.KANAL
0000	IGAPCL	OFFENER HEISSPALT MOEGLICH (0)
0001	IHGAP	WARMEDURCHGANGSZAHLE KONSTANT
0002	IPLAST	PLAST.MODELL SPROEDE/DUKTIL
0000	IFROZ = 0	BR. FRIERT I Z.K. NICHT AUS
0001	IKOSW	TRANS. BRENNSTOFFSCHWELLEN FUER MW
0000	IGAKO = 1	FI.GA. I. KORNB. BERUECKS.
0002	IGAK	SPALTSCHLIESSGRAD WIRD BERECHNET N. ANS.
0001	IDAM	AUSW. PARAM. F. H.SCHADENSKRITERIUM
609.0	CHINOW	STAT. STABLEISTUNG VOR TRANSIENTE, W/CM
3.0	GHEAT	STAT. GAMMALEISTUNG, W/G AL
.0050	DELT	MAXIMALER ZEITSCHRITT FUER TRANSIENTE, S
.0005	DELMIN	MINIMALER ZEITSCHRITT FUER TRANSIENTE, S
0.0	DLOF	ZEITKONSTANTE WAERMEUEBERGANG HUE/KUEHLM.
3.50000E-4	GKO	CORED.MR. BRENNSTOFFKORN, CM
1.50000E-4	DELKG	EFF. KORNGRENZENSCHICHTDICKE, CM
1900.	TGLIM	GRENZTEMPERATUR FUER VOLLST. GASFREIS., C
2650.	TSUPL	GRENZTEMPERATUR FUER MELT-CAVITY
0.800	FGRES	ANT. D SPALTGASINV. D I D SCHM.ZONE VERBL.IST
0.400	FINST	FGANT. I D SCHM. DER INSTANT. ZUR CAV.PR.B.T.
0.10000E-4	RMPAR	RAD. DES NAHBER. IN DER SCHMELZE Z AUSF. D FIGA

250.00	DCHI	REL. LEISTUNGSERHOEHUNG, --
0.0152	BTEMP	PULS-HALBWERTSBREITE, S
0.0760	TRAMP	ZEITPUNKT PULSMAXIMUM, S
.5	TRAMP	ZEITKONSTANTE FUER KUEHLMITTELDURCHSATZ
0.19	TSCRAM	ZEITPUNKT SCRAMAUSLUESUNG, S
0.100	TSTOP	RECHENZEITENDE, S
.5000	TRELAX	ZEITKONSTANTE FUER LEISTUNGSABFALL N. SC., S
1.	TNARED	ZEITKONSTANTE FUER NAT.STROM-ABFALL, S
155.0	DUMA	KUEHLMITTELDURCHSATZ, G/S
0.0	DDUMA	DUMA-AENDERUNG, G/S
7.0	DUREL	DURCHSATZ-RELAXATIONSZEIT
855.	TCTOP	NA-AUSTRITTSTEMPERATUR BEI DER TOP AUSG. WIRD
270.	VCOOL	KUEHLMITTELSTROMGESCHW. M/S
400.0	TNAE	KUEHLM. EINTR.TEMP, C
0.0	DTNAE	KUEHLM. EINTR.TEMP.AENDERUNG, C
75.0	SLF	BRENNSTOFFSAEULENLAENGE, CM
38.0	PLENL	PLENUMLAENGE, CM
1.00	FCLCRA	RISSFLAECHE IN DER HUELLE, CM*CM
0.0	AXVER	VERSCHIEBUNG DES L.MAXIMUMS AUS DER SYM.EB.
3.2000	AXFAK	MAX.LEISTUNG/LEISTUNG BEI Z=0 BEI SYMM. VERH.
0.3	FRATIO	VERHAELTNIS GITTER/BLASENSPALTGAS
.75	FBRAVE	M.W. D.VERH. BLASENGAS I KORN/ BLASENGAS TOT
.75	FPRMAX	MAX. D. VERH. BLASENGAS I KORN/ BLASENGAS TOT
0.50000E-4	RAU1	RAUHIGKEIT HUELLRUHRINNENSEITE, CM
0.50000E-4	RAU2	RAUHIGKEIT BRENNSTOFFTABLETTE, CM
1.000	HGAP0	KONSTANTES HGAP (IHGAP=2 UDER 4)
0.235	RELOC	SPALTSCHLIESSGRAD DURCH RELOCATION BEI A=0
0.000	VFRAG	BR. FRAGMENTIERUNG CM**3/CM**3
0.995	RIVER	RISSVERFUEGBARKEIT FUER DIE SCHMELZDEHNUNG
0.02	DEFRA	BRUCHDEHNUNG DER HUELLE
0.010	RHYDPU	MINIMALER HYDRAUL. RADIUS UNTEN
0.010	RHYDPO	MINIMALER HYDRAUL. RADIUS OBEN
50.0	DTSM	TEMP.INTERVALL FUERS BRENNSTOFFSCHMELZEN
435.	CHISTA	MAX. STABLEISTUNG BEI VORBESTR., W/CM
113.	DUMAV	MASSENDURCHSATZ BEI DER VORBESTRAHLUNG
400.	NA	EINTRITTSTEMPERATUR BEI DER VORBESTRAHLUNG
10.	DOS	SCHNELLE N.DOSIS IN DPA(NRT)
0.8	HGAPSM	WARMEUEBERGANGSKOEFFIZIENT B/H B. VB
0.5	HGASMI	WARMEUEBERGANGSKOEFFIZIENT B/H B. VB
13.	HSCSTA	WARMEUEBERGANGSKOEFFIZIENT H/NAT, W/CM K
1.76	VAXFAK	AX. FORMFAKTOR B. VB
3.25	AHOEX	VERSCHIEBUNG BS-MITTE/FLUSSMAX. B.VB, CM
0.00000E-4	VBRELO	RELOCATION NACH VORBESTRAHLUNG
0.0020	UCPLM	MAX. PLASTISCHE H.DEHN. D. V.BESTR., CM/CM